# **EUROPEAN PATENT OFFICE**

# **Patent Abstracts of Japan**

**PUBLICATION NUMBER** 

2003135087

**PUBLICATION DATE** 

13-05-03

**APPLICATION DATE** 

05-11-01

**APPLICATION NUMBER** 

2001338836

APPLICANT:

**NISHIMURA YOSHIFUMI**;

INVENTOR: NISHIMURA YOSHIFUMI;

INT.CL.

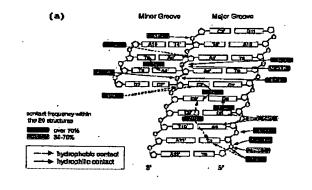
C12N 15/09 C12Q 1/68 G01N 33/15

G01N 33/50 G01N 33/53 G01N 33/566

TITLE

**USE OF THREE-DIMENSIONAL** 

STRUCTURE OF COMPLEX OF **TELOMERE DNA AND HUMAN TRF1** 











ABSTRACT :

PROBLEM TO BE SOLVED: To provide a method for screening a useful compound by using information obtained by the analysis of a three-dimensional structure of a complex of a DNA-bonded domain and a telomere DNA of human TRF1.

SOLUTION: The method for screening a compound recognizing the region from the 4th A to the 9th T in the nucleotide sequence 5'-GTTAGGGTTAGG-3' (sequence No.1) or its complementary strand existing in a telomere DNA contains a step to analyze the three-dimensional structure of a complex of a telomere DNA and a test compound or a part of the compound.

COPYRIGHT: (C)2003,JPO

# (19) 日本国特許庁 (J P) (12) 公開特許公報 (A)

(11)特許出願公開番号 特期2003-135087 (P2003-135087A)

(43)公開日 平成15年5月13日(2003.5.13)

(51) Int.Cl. <sup>7</sup>		識別記号		FΙ			ร์	-7]-}*(参考)
C12N	15/09	ZTD		C 1 2	Q 1/68		ZNAA	2G045
C 1 2 Q	1/68	ZNA		G 0 1	N 33/15		Z	4 B 0 2 4
G01N	33/15				33/50		Z	4B063
	33/50				33/53		D	
	33/53				•		M	
			審査請求	未請求	請求項の数14	OL	(全518頁)	最終頁に続く

(21)出願番号

特願2001-338836(P2001-338836)

(22)出顧日

平成13年11月5日(2001.11.5)

特許法第30条第1項適用申請有り 2001年10月6日~8 日 日本生物物理学会主催の「日本生物物理学会」第39 回年会講演会」において文書をもって発表

(71)出顧人 501429221

西村 善文

東京都三鷹市下連省2-20-6

(72)発明者 西村 善文

東京都三鷹市下連省2-20-6

(74)代理人 100098121

弁理士 間山 世津子 (外1名)

Fターム(参考) 20045 AA34 AA35 AA40 BA11 BB50

DA12 DA13 DA14 DA36 FB02

4B024 AA11 BA80 CA04 CA09 DA06

GA11 HA03

4B063 QA18 QR32 QR48 QR55 QS28

QS34 QX07

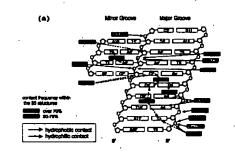
#### (54) 【発明の名称】 テロメアDNAとヒトTRF1複合体の立体構造の利用

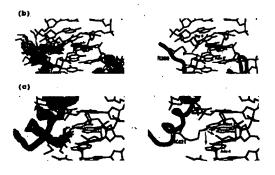
#### (57)【要約】

【課題】 ヒトTRF1のDNA結合ドメインとテロメアDNAの 結合部位の複合体の三次元構造を解析して得られた情報 を利用して、有用な化合物をスクリーニングする方法を 提供すること。

【解決手段】 被験化合物又はその一部とテロメアDN Aとの複合体の立体構造を調べる工程を含む、テロメア DNA中に存在する下記のヌクレオチド配列中の4番目 のAから9番目のTまでの部位またはその相補鎖を認識 する化合物をスクリーニングする方法。

5'-GTTAGGGTTAGG-3'(配列番号1)





2

# 【特許請求の範囲】

【請求項1】 被験化合物又はその一部とテロメアDN Aとの複合体の立体構造を調べる工程を含む、テロメア DNA中に存在する下記のヌクレオチド配列中の4番目 のAから9番目のTまでの部位またはその相補鎖を認識 する化合物をスクリーニングする方法。

1

#### 5'-GTTAGGGTTAGG-3'(配列番号1)

【請求項2】 配列番号1のヌクレオチド配列中の4番 目のAから9番目のTまでの部位またはその相補鎖を認 識する化合物が、下記の(i)~(ix)からなる群より選択 される少なくとも1つの部位を含む請求項1記載の方 法。

(i) 配列番号1のヌクレオチド配列中の4番目のA、5 番目のG、及び4番目のAと5番目のGとの間に存在す るリン酸基と相互作用をする少なくとも1つの部位、(i i) 配列番号1のヌクレオチド配列中の6番目のGと水 素結合を形成する相補鎖のC及び3番目のTと相互作用 をする少なくとも1つの部位、(iii) 配列番号1のヌク レオチド配列中の6番目のGと相互作用をする少なくと も1つの部位、(iv) 配列番号1のヌクレオチド配列中 の6番目のCと水素結合を形成する相補鎖のC及び7番 目のGと水素結合を形成する相補鎖のCと相互作用をす る少なくとも1つの部位、(v) 配列番号1のヌクレオチ ド配列中の7番目のGと水素結合を形成する相補鎖のC 及びそれに結合する糖と相互作用をする少なくとも1つ の部位、(vi) 配列番号 1 のヌクレオチド配列中の7番 目のGと水素結合を形成する相補鎖のCと、8番目のT と水素結合を形成する相補鎖のAとの間に存在するリン 酸基と相互作用をする少なくとも1つの部位、(vii)配 列番号1のヌクレオチド配列中の8番目のTと水素結合 30 を形成する相補鎖のA及び9番目のTと相互作用をする 少なくとも1つの部位、(viii) 配列番号1のヌクレオ チド配列中の8番目のTと水素結合を形成する相補鎖の Aと、9番目のTと水素結合を形成する相補鎖のAとの 間に存在するリン酸基と相互作用をする少なくとも1つ の部位、及び(ix) 配列番号1のヌクレオチド配列中の 9番目のTと水素結合を形成する相補鎖のAに結合する 糖と相互作用をする少なくとも1つの部位。

【請求項3】 (i)の部位がリシンであり、(ii)の部位 がバリンであり、(iii)の部位がアルギニンであり、(i v)の部位がアスパラギン酸であり、(v)の部位がメチオ ニンであり、(vi)の部位がアルギニン及び/又はグルタ ミンであり、(vii)の部位がアスパラギン酸であり、(vi ii)の部位がアルギニン及び/又はトリプトファンであ り、(ix)の部位がトレオニンである請求項2記載の方 法。

【請求項4】 配列番号1のヌクレオチド配列中の4番 目のAから9番目のTまでの部位またはその相補鎖を認 識する化合物が、さらに、下記の(x)~(xiii)からなる 群より選択される少なくとも1つの部位を含む請求項2 50 5'-GTTAGGGTTAGG-3'(配列番号1)

記載の方法。(x) 配列番号1のヌクレオチド配列中の2 番目のTと3番目のTとの間に存在するリン酸基と相互 作用をする少なくとも1つの部位、(xi) 配列番号1の ヌクレオチド配列中の2番目のTと3番目のTとの間に 存在するリン酸基と相互作用をし、3番目のTと疎水性 の相互作用をする少なくとも 1 つの部位、(xii) 配列番 号1のヌクレオチド配列中の3番目のTと4番目のAと の間に存在するリン酸基と相互作用をする少なくとも1 つの部位、及び(xiii) 配列番号1のヌクレオチド配列 中の10番目のAと水素結合を形成する相補鎖のTと、 11番目のGと水素結合を形成する相補鎖のCとの間に 存在するリン酸基と相互作用をする少なくとも1つの部

(x)の部位がセリンであり、(xi)の部位 【請求項5】 がセリンであり、(xii)の部位がトリプトファンであ り、(xiii)の部位がリシンである請求項4記載の方法。 【請求項6】 被験化合物とテロメアDNAとの複合体 の立体構造を調べ、その立体構造から、テロメアDNA 中に存在する下記のヌクレオチド配列中の4番目のAか 20 ら9番目のTまでの部位またはその相補鎖を認識するこ とが確認又は予測された化合物を製造する工程を含む、 テロメアDNA中に存在する下記のヌクレオチド配列中 の4番目のAから9番目のTまでの部位またはその相補 鎖を認識する化合物を製造する方法。

#### 5'-GTTAGGGTTAGG-3'(配列番号1)

【請求項7】 被験化合物がテロメアDNA中に存在す る下記のヌクレオチド配列中の4番目のAから9番目の Tまでの部位またはその相補鎖を認識するか否かを解析 し、認識する場合には、テロメアDNAとTRF1との 結合を制御することができると判定する工程を含む、テ ロメアDNAとTRF1との結合を制御することができ る化合物をスクリーニングする方法。

#### 5'-GTTAGGGTTAGG-3'(配列番号1)

【請求項8】 被験化合物がテロメアDNA中に存在す る下記のヌクレオチド配列中の4番目のAから9番目の Tまでの部位またはその相補鎖を認識するか否かを解析 し、認識する場合には、テロメアDNAとTRF1との 結合を制御することができると判定し、テロメアDNA とTRF1との結合を制御することができると判定した 40 化合物を製造する工程を含む、テロメアDNAとTRF 1との結合を制御することができる化合物を製造する方 法。

# 5'-GTTAGGGTTAGG-3'(配列番号1)

【請求項9】 被験化合物がテロメアDNA中に存在す る下記のヌクレオチド配列中の4番目のAから9番目の Tまでの部位またはその相補鎖を認識するか否かを解析 し、認識する場合には、TRF1のアゴニストであると 判定する工程を含む、TRFIのアゴニストをスクリー ニングする方法。

【請求項10】 被験化合物がテロメアDNA中に存在する下記のヌクレオチド配列中の4番目のAから9番目のTまでの部位またはその相補鎖を認識するか否かを解析し、認識する場合には、TRF1のアゴニストであると判定し、TRF1のアゴニストであると判定した化合物を製造する工程を含む、TRF1のアゴニストを製造

# 5'-GTTAGGGTTAGG-3'(配列番号1)

する方法。

【請求項11】 被験化合物がテロメアDNA中に存在する下記のヌクレオチド配列中の4番目のAから9番目 10のTまでの部位またはその相補鎖を認識するか否かを解析し、認識する場合には、TRF1のアンタゴニストであると判定する工程を含む、TRF1のアンタゴニストをスクリーニングする方法。

#### 5'-GTTAGGGTTAGG-3'(配列番号1)

【請求項12】 被験化合物がテロメアDNA中に存在する下記のヌクレオチド配列中の4番目のAから9番目のTまでの部位またはその相補鎖を認識するか否かを解析し、認識する場合には、TRF1のアンタゴニストであると判定し、TRF1のアンタゴニストであると判定 20した化合物を製造する工程を含む、TRF1のアンタゴニストを製造する方法。

# 5'-GTTAGGGTTAGG-3'(配列番号1)

【請求項13】 表2及び/又は3のヒトTRF1の一部の3次元構造座標の全部又は一部を記録しているコンピュータ読み取り可能な記録媒体。

【請求項14】 表2及び/又は3のヒトTRF1の一部の3次元構造座標の全部又は一部を利用して、テロメアDNAと結合する化合物を同定、検索、評価又は設計する方法。

#### 【発明の詳細な説明】

#### [0001]

【発明の属する技術分野】本発明は、テロメアDNAと ヒトTRF1複合体の立体構造の利用に関し、より詳細 には、テロメアDNAとヒトTRF1複合体の立体構造 を利用して、テロメアDNAと結合することができる化 合物をスクリーニングする方法、テロメアDNAとTR F 1 (telomeric repeat binding factor 1)との結合を 制御することができる化合物をスクリーニングする方 法、TRF1のアゴニストをスクリーニングする方法、 TRF1のアンタゴニストをスクリーニングする方法、 前記の化合物を製造する方法、テロメアDNAに結合又 は未結合のヒトTRF1の3次元構造座標を記録してい るコンピュータ読み取り可能な記録媒体、テロメアDN Aに結合又は未結合のヒトTRF1の3次元構造座標を 利用して、テロメアDNAと結合する化合物を同定、検 索、評価又は設計する方法、並びにヒトTRF1タンパ ク質断片及びその変異体に関する。

#### [0002]

【従来の技術】テロメアはタンパク質/DNA複合体の 50

構造であり、真核生物の線状の染色体の物理的末端を作 っており、染色体の安定性に不可欠である。テロメア は、分解や末端から末端への融合から染色体の末端を保 護している。ほとんどの真核生物では、テロメアは二重 鎖のタンデムに繰り返したTGに富む配列(普通は5~8 塩基対の長さである)の二重鎖のDNAからなっていて、 その後に3'末端に1本鎖のDNAが飛び出している(Bla ckburn, 1992 and 1994; Zakian, 1995)。テロメアDNA の二重鎖のDNAの繰り返し配列に特異的なタンパク質が 結合する。例えば、出芽酵母のRapl、分裂酵母のTazl p、コメのRTBP1、脊椎動物で見つかっているTRF1および TRF2 (Shore and Nasmyth, 1987; Klein et al., 1992; Cooper et al., 1997; Yu et al., 2000; Chong et a 1., 1995; Bilaud et al., 1997; Broccoli et al., 19 97)がある。これらのテロメアタンパク質はテロメアの 長さを負に制御しているという重要な役割を持っていて (Krauskopf and Blackburn, 1996; Cooper et al., 199 7; van Steensel and de Lang, 1997; Smogorzewska et al., 2000) 、お互いに構造的に関係している。その構 造的に関係しているというのは、少なくとも一つのMyb ドメインをDNA結合ドメインの中に持っている(Konig a nd Rhodes, 1997; Brun et al., 1997; Yu et al., 200 0)。

【0003】脊椎動物のTRF1、すなわち、TTAGGC繰り返 し結合因子1は、3つの機能ドメインを持っている。N 末の酸性ドメイン、中央のTRF特異的/二量化ドメイン (Bianch et al., 1997)、そしてC末のDNA結合ドメイ ン (Chong et al., 1995)。TRF1のDNA結合ドメイン は、その配列で転写活性化因子のc-Myb (Chong et al., 1995) のDNA結合ドメイン中に存在するMybリピートに 関係している。TRF1は一つのMybドメインを含んでいる が、DNAに結合するときには二量体で結合する。c-Mybの DNA結合ドメインは不完全にタンデムなMybリピートが3 つ繰り返しており、R1、R2、R3と呼ばれている(Lipsic k 1996; Martin and Paz-Ares, 1997を参照のこと)。T RF1のMybドメインが存在することは、NMRで、ヒトTRF1 からとってきたMybドメインの三次元構造を決定するこ とで確認された (Nishikawa et al., 1998) 。期待され た通り、それはc-Mybに存在する3つのMybリピート(Og ata et al., 1992 and 1995) の各々と構造的に非常に 近くて、3つのヘリックスを持っている。Mybドメイン の3つのヘリックスの中で、2番目と3番目のヘリック スがヘリックスーターンーヘリックス (HTH) モチーフ の変異体になっている。 c-Mybの配列特異的なDNA結合 は、R2とR3が必要で十分であるが、R1はDNA結合におい ては特に何の役割も持っていない (Tanikawa et al., 1 993; Ogata et al., 1995) 。

【0004】今日まで、テロメアタンパク質が二重鎖DN Aをどのように認識しているのかという情報は、出芽酵母Saccharomyces cerevisiaeのRaplpのDNA結合ドメイン

の結晶構造から得られている。それは、テロメアDNA結 合部位との複合体の構造として得られている (Konig et al., 1996; Taylor et al., 2000)。その構造から、 アミノ酸配列は他の公知のDNA結合ドメインとの類似性 は全くないにもかかわらず、RaplpのDNA結合ドメインは 2つの構造的によく似たサブドメインD1及びD2からなっ ている。これらのサブドメインは構造的にMybリピート やホメオドメインと非常によく似ている(Konig et a 1., 1996)。Mybリピートとホメオドメインは2つともH TH DNA結合モチーフのスーパーファミリーに属している 10 が、DNAの結合様式は少し異なる。DNAの大きな溝でHTH モチーフが特異的に認識して、DNAの小さな溝でN末端の 腕が認識しているという認識様式は、ホメオドメインの ように2つのサブドメインのRap1pがDNAに結合している 様式に似ている。2つのサブドメインは非常に長いリン カー(鎖)でつながれていて、各々のサブドメインはコ アの配列TCTCCを認識している。それは、8塩基対離れ ていて、DNA上でタンデムに配向している。それに比べ て、c-Mybの最小のDNA結合ドメインとDNAとの複合体で は、R2とR3はDNAの大きな溝に密にパックされている。 そして、短い共通の結合配列であるTAACNGを協調的に認 識している(Ogata et al., 1994)。それに対して、TR F1は一つのMybドメインをそのC末端に持っており、中央 のTRF特異的/二量化ドメインで安定なホモの二量体を 形成し、2つのMybドメインをDNA上に同時に配置する が、その時に協調性は全く見られない (Bianchi et a 1., 1999)。c-MybのMybドメイン単独ではDNAを配列特 異的に結合するには不十分である(Tanikawa et al., 1 993)が、TRF1の単離した一つのMybドメインは試験管内 でヒトテロメアの二重鎖DNAと非常に強く結合すること ができる(Konig et al.,1998)。

### [0005]

【発明が解決しようとする課題】本発明は、ヒトTRF1の DNA結合ドメインとテロメアDNAの結合部位の複合体の三 次元構造を解析することを目的とする。

【0006】また、本発明は、ヒトTRF1のDNA結合ドメインとテロメアDNAの結合部位の複合体の三次元構造を解析して得られた情報を利用して、有用な化合物をスクリーニングする方法を提供することも目的とする。

#### [0007]

【課題を解決するための手段】本発明者らは、ヒトTRF1のDNA結合ドメインとテロメアDNAの結合部位の複合体の三次元構造をNMRを用いて決定した。構造上最も新規な点は、HTHモチーフのDNA認識へリックスによって、DNAの大きな溝で認識しているのに加えて、N末端の腕がDNA結合に伴って規則的になって、DNA結合表面を伸ばして、DNAの小さな溝で塩基を認識していることである。この結合様式は、ホメオドメインやRaplpの2つのサブドメインで見られているのに似ているが、タンパク質の構造が少し違うので、TRF1のDNA結合ドメインのDNA上で50

の空間的配置が若干異なっている。大きな溝で3つのへリックスが配置している様子は、c-Mybリピートの配置(Ogataet al., 1994)と非常に似ていて、Raplpのサブドメイン(Konig et al., 1996)やこれまで調べられているホメオドメインの配置(Gehring et al., 1994)とは異なっている。さらに、各々の塩基対がDNA認識にどのように寄与しているかということをNMRを用いて調べた。また、沢山のDNA変異体も用いて調べた。また、モデル構築によって、TRF1はAGGGTT配列がヒトテロメア中で繰り返しタンデムに並んでいるのを連続的に、しかも全く空間的に障害なく結合できることがわかった。本発明は、上記の知見により完成されたものである。

【0008】すなわち、本発明は、被験化合物又はその一部とテロメアDNAとの複合体の立体構造を調べる工程を含む、テロメアDNA中に存在する下記のヌクレオチド配列中の4番目のAから9番目のTまでの部位またはその相補鎖を認識する化合物をスクリーニングする方法を提供する。

5'-GTTAGGGTTAGG-3'(配列番号1)

20 被験化合物は、テロメアDNAと複合体を形成しうるいかなる化合物であってもよく、タンパク質、ペプチド、多糖、オリゴ糖、単糖、低分子化合物、核酸(DNA、RNA、オリゴヌクレオチド、モノヌクレオチド等)などを例示することができる。

【0009】本明細書において、「デロメアDNA」とは、真核生物の染色体の末端に存在するDNAのことをいう。テロメアDNAは、Gに富んだ特異的な配列で哺乳類ではTTAGGGの繰り返し配列からなる。テロメアDNAは3、末端を除いて二重らせんを形成している。テロメアD30 NAの一部は化学合成できる。

【0010】被験化合物とテロメアDNAとの複合体の立体構造を調べるには、X線結晶構造解析、核磁気共鳴(NMR)、中性子回折などによる原子レベルでの立体構造解析や電子顕微鏡、原子間力顕微鏡などによる複合体の形状を観察する方法やテロメアDNAの公知の立体構造に対する任意の構造の被験化合物との安定な結合様式をコンピュータでシュミレートするドッキングスタディなどの手法を用いることができる。

【0011】被験化合物が高分子(例えば、タンパク 40 質)などの場合、その一部(例えば、タンパク質断片) とテロメアDNAとの複合体の立体構造を調べてもよ い。

【0012】本明細書において、「認識」とは、2つの物質の間の結合を意味する。

【0013】配列番号1のヌクレオチド配列中の4番目のAから9番目のTまでの部位またはその相補鎖を認識する化合物は、テロメアDNAとTRF1との結合を制御することができるかもしれないので、細胞の老化を進めたりあるいは逆に遅らせたりする活性、細胞のがん化を遅らせる活性、がん細胞の細胞死を進めるような生理

活性を持つことが予想される。そうであれば、上記の化 合物は、抗がん剤、細胞老化抑制剤、細胞老化促進剤等 に利用することができる。

【0014】配列番号1のヌクレオチド配列中の4番目 のAから9番目のTまでの部位またはその相補鎖を認識 する化合物は、TRF1と同じ生理活性、例えば、細胞 の老化を進めたりあるいは逆に遅らせたりする活性、細 胞のがん化を遅らせる活性、がん細胞の細胞死を進める ような生理活性を持つことも予想される。そうであれ ば、上記の化合物は抗がん剤、細胞老化抑制剤、細胞老 10 化促進剤等に利用することができる。

【0015】あるいはまた、配列番号1のヌクレオチド 配列中の4番目のAから9番目のTまでの部位またはそ の相補鎖を認識する化合物は、TRF1の生理活性を減 少ないし消失させる生理活性を持つことも予想される。 そうであれば、上記の化合物は、細胞の老化を進めたり あるいは逆に遅らせたりする活性、細胞のがん化を遅ら せる活性、がん細胞の細胞死を進めるような生理活性を 持つことも予想される。そうであれば、上記の化合物は 抗がん剤、細胞老化抑制剤、細胞老化促進剤等に利用す 20 ルギニンを例示することができる。 ることができる。

【0016】配列番号1のヌクレオチド配列中の4番目 のAから9番目のTまでの部位またはその相補鎖を認識 する化合物は、下記の(i)~(ix)からなる群より選択さ れる少なくとも1つの部位を含むとよい。

(i) 配列番号1のヌクレオチド配列中の4番目のA、5 番目のG、及び4番目のAと5番目のGとの間に存在す るリン酸基と相互作用をする少なくとも1つの部位、(i i) 配列番号1のヌクレオチド配列中の6番目のGと水 素結合を形成する相補鎖のC及び3番目のTと相互作用 30 をする少なくとも1つの部位、(iii) 配列番号1のヌク レオチド配列中の6番目のGと相互作用をする少なくと も1つの部位、(iv) 配列番号1のヌクレオチド配列中 の6番目のCと水素結合を形成する相補鎖のC及び7番 目のGと水素結合を形成する相補鎖のCと相互作用をす る少なくとも1つの部位、(v) 配列番号1のヌクレオチ ド配列中の7番目のGと水素結合を形成する相補鎖のC 及びそれに結合する糖と相互作用をする少なくとも1つ の部位、(vi) 配列番号1のヌクレオチド配列中の7番 目のGと水素結合を形成する相補鎖のCと、8番目のT 40 と水素結合を形成する相補鎖のAとの間に存在するリン 酸基と(親水性の)相互作用をする少なくとも1つの部 位、(vii) 配列番号1のヌクレオチド配列中の8番目の Tと水素結合を形成する相補鎖のA及び9番目のTと相 互作用をする少なくとも1つの部位、(viii) 配列番号 1のヌクレオチド配列中の8番目のTと水素結合を形成 する相補鎖のAと、9番目のTと水素結合を形成する相 補鎖のAとの間に存在するリン酸基と相互作用をする少 なくとも1つの部位、及び(ix) 配列番号1のヌクレオ チド配列中の9番目のTと水素結合を形成する相補鎖の 50 オチド配列中の3番目のTと4番目のAとの間に存在す

Aに結合する糖と相互作用をする少なくとも1つの部

【0017】上記の「部位」とは、一つの分子中の一部 分構造であり、例えば、アミノ酸残基、官能基、塩基な どを例示することができる。

【0018】上記の「相互作用」とは、2つ以上の物体 (例えば、原子、分子) の間に力が働きあうことをい う。相互作用としては、親水性の相互作用(例えば、水 素結合、塩橋)、疎水性の相互作用(例えば、疎水結 合)、静電相互作用、ファンデルワールス相互作用など を例示することができる。

【0019】(i)の相互作用は、親水性の相互作用であ るのが好ましい。その場合、(i)の部位として、リシン を例示することができる。

【0020】(ii)の相互作用は、疎水性の相互作用であ るのが好ましい。その場合、(ii)の部位として、バリン を例示することができる。

【0021】(iii)の相互作用は、親水性の相互作用で あるのが好ましい。その場合、(iii)の部位として、ア

【0022】(iv)の相互作用は、親水性の相互作用であ るのが好ましい。その場合、(iv)の部位として、アスパ ラギン酸を例示することができる。

【0023】(v)の相互作用は、疎水性の相互作用であ ·るのが好ましい。その場合、(v)の部位として、メチオ ニンを例示することができる。

【0024】(vi)の相互作用は、親水性の相互作用であ るのが好ましい。その場合、(vi)の部位として、アルギ ニン及び/又はグルタミンを例示することができる。

【0025】(vii)の相互作用は、親水性の相互作用で あるのが好ましい。その場合、(vii)の部位として、ア スパラギン酸を例示することができる。

【0026】(viii)の相互作用は、親水性の相互作用で あるのが好ましい。その場合、(viii)の部位として、ア ルギニン及び/又はトリプトファンを例示することがで きる。

【0027】(ix)の相互作用は、疎水性の相互作用であ るのが好ましい。その場合、(ix)の部位として、トレオ ニンを例示することができる。

【0028】配列番号1のヌクレオチド配列中の4番目 のAから9番目のTまでの部位またはその相補鎖を認識 する化合物は、さらに、下記の(x)~(xiii)からなる群 より選択される少なくとも1つの部位を含むとよい。

(x) 配列番号1のヌクレオチド配列中の2番目のTと3 番目のTとの間に存在するリン酸基と相互作用をする少 なくとも1つの部位、(xi) 配列番号1のヌクレオチド 配列中の2番目のTと3番目のTとの間に存在するリン 酸基と相互作用をし、3番目のTと疎水性の相互作用を する少なくとも1つの部位、(xii) 配列番号1のヌクレ

るリン酸基と相互作用をする少なくとも1つの部位、及 び(xiii) 配列番号1のヌクレオチド配列中の10番目 のAと水素結合を形成する相補鎖のTと、11番目のG と水素結合を形成する相補鎖のCとの間に存在するリン 酸基と相互作用をする少なくとも1つの部位。

【0029】(x)の相互作用は、親水性の相互作用であ るのが好ましい。その場合、(x)の部位として、セリン を例示することができる。

【0030】(xi)の相互作用は、親水性の相互作用であ るのが好ましい。その場合、(i)の部位として、セリン を例示することができる。

【0031】(xii)の相互作用は、親水性の相互作用で あるのが好ましい。その場合、(xii)の部位として、ト リプトファンを例示することができる。

【0032】(xiii)の相互作用は、親水性の相互作用で あるのが好ましい。その場合、(xiii)の部位として、リ シンを例示することができる。

【0033】また、本発明は、被験化合物とテロメアD NAとの複合体の立体構造を調べ、その立体構造から、 テロメアDNA中に存在する下記のヌクレオチド配列中 20 の4番目のAから9番目のTまでの部位またはその相補 鎖を認識することが確認又は予測された化合物を製造す る工程を含む、テロメアDNA中に存在する下記のヌク レオチド配列中の4番目のAから9番目のTまでの部位 またはその相補鎖を認識する化合物を製造する方法を提っ 供する。

#### 5'-GTTAGGGTTAGG-3'(配列番号1)

テロメアDNA中に存在する上記のヌクレオチド配列 (配列番号1) 配列中の4番目のAから9番目のTまで の部位またはその相補鎖を認識する化合物を製造するに 30 は、公知の方法、すなわち、化学的合成法、遺伝子工学 的方法、酵素工学的の方法などのいずれの方法を用いて もよい。

【0034】さらに、本発明は、被験化合物がテロメア DNA中に存在する下記のヌクレオチド配列中の4番目 のAから9番目のTまでの部位またはその相補鎖を認識 するか否かを解析し、認識する場合には、テロメアDN AとTRF1との結合を制御することができると判定す る工程を含む、テロメアDNAとTRF1との結合を制 御することができる化合物をスクリーニングする方法を 40 提供する。

# 5'-GTTACGGTTACG-3'(配列番号1)

本明細書において、「TRF1」とは、TTAGGGリピート 結合因子1またはテロメアリピート結合因子1をいう。 TRF1は、脊椎動物の染色体末端に存在すると考えら れていて少なくともヒトやマウスで同定されている。T RF1はN末端部位に酸性アミノ酸に富む領域、中央部 に二量体形成に必要な領域、C末端部位にDNA結合に 必要な領域からなる。TRF1はテロメアDNAに結合 してテロメラーゼ酵素の活性を制御している。テロメラ 50 ストをスクリーニングする方法を提供する。

ーゼはテロメアDNA合成酵素で生殖細胞やがん細胞で 活性化されている。通常の体細胞ではテロメラーゼ酵素 の活性は抑制されているのでテロメアDNA細胞分裂ご とに短縮するのでテロメアDNAの長さは細胞老化のマ ーカーである。TRF1はテロメラーゼの酵素活性の制 御を通じて細胞老化やがん化の制御に関連すると考えら れる。ヒトTRF1のアミノ酸配列はChong, L., van S teensel, B., Broccoli, D., Erdjument-Bromage, H., Hanish, J., Tempst, P., and de Lange, T. (1995). A human telomeric protein. Science 270, 1663-166 7. に記載されている。

【0035】被験化合物がテロメアDNA中に存在する 上記のヌクレオチド配列(配列番号1)配列中の4番目 のAから9番目のTまでの部位またはその相補鎖を認識 するか否かを解析するには、X線結晶構造解析、核磁気 共鳴(NMR)、中性子回折などの立体構造解析、電子 顕微鏡や原子間力顕微鏡などの複合体の形状を観察する 方法やテロメアDNAの公知の立体構造に対する任意の 構造の被験化合物との安定な結合様式をコンピュータで シュミレートするドッキングスタディなどの手法、本発 明者らがこの明細書において開示するヒトTRF1の立 体構造との類似性に基づく判断を用いることができる。 【0036】テロメアDNAとTRF1との結合を制御 することができる化合物は、テロメアDNAとTRF1 との結合を制御することができるかもしれないので、細 胞の老化を進めたりあるいは逆に遅らせたりする活性、 細胞のがん化を遅らせる活性、がん細胞の細胞死を進め るような生理活性を持つことが予想される。そうであれ ば、上記の化合物は、抗がん剤、細胞老化抑制剤、細胞 老化促進剤等に利用することができる。

【0037】本発明は、また、被験化合物がテロメアD NA中に存在する下記のヌクレオチド配列中の4番目の Aから9番目のTまでの部位またはその相補鎖を認識す るか否かを解析し、認識する場合には、テロメアDNA とTRF1との結合を制御することができると判定し、 テロメアDNAとTRF1との結合を制御することがで きると判定した化合物を製造する工程を含む、テロメア DNAとTRF1との結合を制御することができる化合 物を製造する方法を提供する。

#### 5'-GTTACGGTTAGG-3'(配列番号1)

テロメアDNAとTRF1との結合を制御することがで きる化合物を製造するには、公知の方法、すなわち、化 学的合成法、遺伝子工学的方法、酵素工学的の方法など のいずれの方法を用いてもよい。

【0038】本発明は、また、被験化合物がテロメアD NA中に存在する下記のヌクレオチド配列中の4番目の Aから9番目のTまでの部位またはその相補鎖を認識す るか否かを解析し、認識する場合には、TRF1のアゴ ニストであると判定する工程を含む、TRFIのアゴニ

5'-GTTAGGGTTAGG-3'(配列番号1)

11

【0040】本発明は、また、被験化合物がテロメアDNA中に存在する下記のヌクレオチド配列中の4番目のAから9番目のTまでの部位またはその相補鎖を認識するか否かを解析し、認識する場合には、TRF1のアゴニストであると判定し、TRF1のアゴニストであると判定した化合物を製造する工程を含む、TRF1のアゴニストを製造する方法を提供する。

# 5'-GTTAGGGTTAGG-3'(配列番号1)

TRF1のアゴニストを製造するには、公知の方法、すなわち、化学的合成法、遺伝子工学的方法、酵素工学的な方法などのいずれの方法を用いてもよい。

【0041】本発明は、また、被験化合物がテロメアDNA中に存在する下記のヌクレオチド配列中の4番目のAから9番目のTまでの部位またはその相補鎖を認識するか否かを解析し、認識する場合には、TRF1のアンタゴニストであると判定する工程を含む、TRF1のアンタゴニストをスクリーニングする方法を提供する。5'-GTTACCGTTACG-3'(配列番号1)本明細書において、「TRF1のアンタゴニスト」とは、TRF1のテロメアDNAに対する結合親和性及び

は、TRF1のテロメアDNAに対する結合親和性及び/又はTRF1の生理活性を減少ないし消失させる生理活性を持つ物質をいう。TRF1のアンタゴニストは、テロメアDNAとTRF1との結合を制御することができるかもしれないので、細胞の老化を進めたりあるいは逆に遅らせたりする活性、細胞のがん化を遅らせる活性、がん細胞の細胞死を進めるような生理活性を持つことが予想される。そうであれば、上記の化合物は、抗がん剤、細胞老化抑制剤、細胞老化促進剤等に利用するこ40とができる。

【0042】本発明は、また、被験化合物がテロメアDNA中に存在する下記のヌクレオチド配列中の4番目のAから9番目のTまでの部位またはその相補鎖を認識するか否かを解析し、認識する場合には、TRF1のアンタゴニストであると判定し、TRF1のアンタゴニストであると判定した化合物を製造する工程を含む、TRF1のアンタゴニストを製造する方法を提供する。

5'-GTTAGGGTTAGG-3'(配列番号1)

TRF1のアンタゴニストを製造するには、公知の方

法、すなわち、化学的合成法、遺伝子工学的方法、酵素 工学的な方法などのいずれの方法を用いてもよい。

【0043】本発明は、表2及び/又は3のヒトTRF1の一部の3次元構造座標の全部又は一部を記録しているコンピュータ読み取り可能な記録媒体も提供する。

【0044】表2及び/又は3には、TRF1のアミノ酸配列中の371番目のトレオニンから429番目のリシンまでのアミノ酸配列からなる、ヒトTRF1のDNA結合ドメインの3次元構造の座標およびその平均構造の座標が示されている。

【0045】コンピュータ読み取り可能な記録媒体としては、磁気テープ、カセットテープ、フレキシブルディスク、ハードディスク、CD-ROM、MO/MD/DVD、半導体メモリなどを例示することができる。

【0046】さらに、本発明は、表2及び/又は3のヒトTRF1の一部の3次元構造座標の全部又は一部を利用して、テロメアDNAと結合する化合物を同定、検索、評価又は設計する方法を提供する。

【0047】3次元構造をコンピュータ上で例えばSYBYLソフトウェアーで視覚化しその形状や相互作用の詳細を見ることによって形状と相互作用を真似た別の化合物を同定し、また化合物のライブラリーからTRF1とテロメアDNA複合体の結合を変化させる可能性のある化合物をコンピュータ上で検索し、結合が強くなるかを評価し設計することが可能である.テロメアDNAとTRF1との結合を制御することができるかもしれないので、細胞の老化を進めたりあるいは逆に遅らせたりする活性、細胞のがん化を遅らせる活性、がん細胞の細胞死を進めるような生理活性を持つことが予想される。そうであれば、上記の化合物は、抗がん剤、細胞老化抑制剤、細胞老化促進剤等に利用することができる。

【0048】テロメアDNAと結合する化合物は、TRF1と同じ生理活性、例えば、テロメアDNAとTRF1との結合を制御することができるかもしれないので、細胞の老化を進めたりあるいは逆に遅らせたりする活性、細胞のがん化を遅らせる活性、がん細胞の細胞死を進めるような生理活性を持つことが予想される。そうであれば、上記の化合物は、抗がん剤、細胞老化促進剤等に利用することができる。

【0049】あるいはまた、テロメアDNAと結合する 化合物は、TRF1の生理活性を減少ないし消失させる 生理活性を持つことも予想される。そうであれば、上記 の化合物は、抗がん剤、細胞老化抑制剤、細胞老化促進 剤等に利用することができる。

[0050]

#### 【発明の実施の形態】

【実施例】以下、本発明を実施例及び比較例によって具体的に説明する。なお、これらの実施例は、本発明を説 50 明するためのものであって、本発明の範囲を限定するも

のではない。

# 【0051】 結果と議論

13

#### 構造決定

ヒトTRF1のDNA結合ドメインとテロメアDNA結合部位との 複合体の溶液構造を通常の多次元異核NMR法で決定し た。ヒトTRF1のアミノ酸371番-439番(図1A)からなる DNA結合ドメインは、そのN末端にメチオニンをつけて、 Nまたは'<sup>5</sup> N/<sup>13</sup> Cでラベルして大腸菌内で発現 させた。このタンパク質は、我々が以前に構造決定に用 いたもの(378番~430番の残基; Nishikawa et al., 19 98) よりも若干長いので、DNAに結合していないタンパ ク質の構造も決定した。DNAとの複合体には、13merのDN A二量体で、配列は5'-GTTAGGGTTAGGG-3'(配列番号 2) で、TRF1 Mybドメインの結合部位を一つ持っている もの (Konig et al., 1998) を使った。DNA結合状態とD NAに結合していない状態で、各々20個と25個の構造 をプログラムEMBOSS(Nakai et al., 1993)を用いて 4次 元 (4D) のシュミレーテッドアニーリング法で、各々 1341個と916個の実験で得られた制限を使って決 定した。それらの結果は表1にまとめた。図2(a) は、TRF1 MvbドメインとDNAとの複合体の20個の計算 構造を示している。計算した構造は、距離制限に関して 0. 3オングストローム以上はずれたものはなく、角度 制限に関して5°以上離れたものはなかった。骨格のコ ンフォメーションは、今回の計算で非常によく決まって いるが、N末端の9アミノ酸とC末端の6アミノ酸ではそ うではなかった。それらは、NOEの数が少なく、そのた め、非常に柔らかいと考えられる。20個の構造とその 平均構造との間の全体としての根二乗平均(rms)偏 差は、骨格の原子に対して0.65±0.04オングストローム 30 であり、アミノ酸残基のすべての重原子に対して0.97± 0.06オングストロームである。それは、アミノ酸残基Ar g 380-Lys 429、DNA塩基対G1-G11とその相手方のC3'-C 13'での間の計算であった。図2(b)は、DNA複合体 中でタンパク質部分のみの20個の計算結果を示してい る。DNA結合状態の20個の計算構造と平均構造との全 体としての根二乗平均偏差は、骨格の原子に関して0.50 ±0.06オングストロームであり、アミノ酸残基のすべて の重原子に関して1.12±0.09オングストロームであり、 その計算結果は、Arg380番~Lys429番の間で行われた。 【0052】図2 (c) は、DNAに結合していない状態 の25個の計算構造を示す。計算構造は、距離の制限に 関してすべて0.3オングストローム以内で、角度の制限 に関してすべて2°以内である。骨格のコンフォメーシ ョンは、N末端の12アミノ酸、C末端の6アミノ酸を除 いて非常によく決まった。これらのN末端およびC末端の アミノ酸は十分なNOEを持っていなかった。25個の計 算した構造と平均構造の全体としての rms 偏差は、骨 格構造に関して0.46±0.05オングストロームであり、ア ミノ酸残基Trp383番~Lys429番のすべての重原子に関し 50

て1.06±0.05オングストロームであった。DNAに結合し ていない状態の構造は、既に我々がもっと短いタンパク 質で決めた構造 (Nishikawa et al., (1998)) と本質的 には全く同じである。

# DNA結合によってN末端の腕は固くなる

DNA結合状態およびDNAに結合していない状態のTRF1のDN A結合ドメインは両方とも、3つのヘリックス領域を持 っていて、1番目のヘリックスはTrp385番~Tyr398番、 2番目のヘリックスはTrp403番~His409番、3番目のへ リックスはSer417番~Lys429番であり、それにともなっ て2つのターンがあり、1番目のターンはGly399番~As n402番、2番目のターンはTyr410番~Thr416番であり、 Leu430番~I1e433番の構造はヘリカルターンの構造をと っており、それで3番目のヘリックスのC末端に直接結 合している。この3つのヘリックスは以下のアミノ酸で 形成されている疎水性のコアで維持されている。そのア ミノ酸は、Trp 383番、Leu391番、Val 395番、Trp 403 番、Ile 406番、Phe 412番、Leu 420番、Arg 423番、Tr p 424番、Met 427番、及び2つの塩橋(Glu 387番~Arg 417番およびAsp 388番~Arg 423番によって形成される 塩橋)によって維持されている。2番目と3番目のヘリ ックスはHTHモチーフの変異体を構成しており、典型的 なHTHタンパク質中のターンに比較すると、3残基長い ターンで構成されている。DNA結合及びDNAに結合してい ない状態のDNA結合ドメインの全体の構造は、お互いに 非常によく似ていて、Trp 383番~Lys 429番のアミノ酸 の骨格の原子について、 r m s は0.89オングストローム であった。2つの構造の最も驚くべき違いは、N末端の 腕のコンフォメーションで見つかっている。それは、DN A結合状態のアミノ酸Arg 378番~Ala 382番が、DNAに結 合していない状態に比べてかなりはっきりしたコンフォ メーションをとっている。そして、DNA結合に伴って規 則的な構造になっている。前にも述べたように、TRF1 D NA結合ドメインのDNA結合状態と非結合状態の構造の比 較から、3つのヘリックスの束Trp 383番~Lys 429番の 高次構造はお互いにほとんど同一であるが、N末端とC末 端のいくつかの残基は、構造的にそれから運動的な変化 がDNA結合に伴って見られた。図2 (d) は、{ H}-15 N 異核種のNOEの測定によって示されている主鎖の動的構 造を示している。これらの測定から、N末端のアミノ酸A rg 378番~Ala 382番は、DNAに結合していないときには 非常に柔らかくて、不規則な構造をとっているが、DNA 結合に伴って、より固いコンフォメーションに変化して いる。それは、Arg 380番がDNAの小さな溝でTT配列を認 識していて、その隣のアミノ酸のGln 381番とTrp 383番 がDNAの糖ーリン酸骨格と相互作用している。N末端ほど 劇的ではないが、C末端のいくつかのアミノ酸Leu 430番 ~Ile 433番もDNA結合に伴ってやはり安定化される。さ らに、DNAに結合した状態では、ほとんどすべてのアミ ノ酸が強い異核種のNOEを示しているので、全体とし

て、DNA結合ドメインはDNA結合によって安定化している

15

と考えられる。 【0053】TRF1によるテロメアDNAの認識 TRF1のDNA結合ドメインがDNAの配列を特異的に認識する のは、3番目のヘリックス(いわゆる、「DNA認識ヘリ ックス」)をDNAの大きな溝に配置して、N末端の腕が糖 ーリン酸骨格を横切って、DNAの小さな溝で特異的に接 触することに起因する(図2(a))。それで、配列TA GGGTTを認識する。図3(a)は、TRF1のDNA結合ドメイ ンのDNA認識に関わる相互作用をまとめて示している。D 10 NAの大きな溝で、3番目のT(T3)のメチル基は、Val 418 番のメチル基の一つにより認識されている。また、Ser 417番のメチレン基によっても認識されている。A4とG5 はLys 421番によって認識されているようだ。G6の7位 の窒素原子とC=O原子は、Arg 425番のグアニジノ基との 水素結合によって認識されている。Asp 422番は、G7の 相手方のC7'とG6の相手方のC8'の両方のアミノ基と相 互作用しているようだ。Met 419番のメチル基は、Val 4 18番のメチル基の一つ及びAsp 422番のメチレン基と一 緒に、疎水的な群れをつくって、DNAとの間に存在して いる。そして、C7'及びC8'の塩基並びにC7'の骨格の 糖と相互作用している。DNAの小さな溝では、Arg 380番 がT9の0<sup>2</sup>原子及びA6'(T8の相手の原子)のN<sup>3</sup>原子と相 互作用している。それは、図3(b)に示した。この小 さな溝での認識は、ホメオドメインを思わせ、さらに は、Rap1pのサブドメイン (Konig et al., 1996; Taylo r et al., 2000) をも思わせる。ホメオドメインでは、 一つのアルギニンがDNAの小さな溝でATに富む配列を認 識している。例えば、TT配列はMatα2で認識され(Wolb erger et al., 1991)、TT配列はUbxホメオドメインで 認識され (Passneret al., 1999) 、TA配列はエングレ イルドホメオドメインで認識され(Kissinger et al., 1990)、AT配列はペアドボックスホメオドメインで認識~ される (Wilson et al., 1995)。Raplpでは、各々のサ ブドメイン中の一つのリジンがアデニンと相互作用して いる。さらに、TRF1のDNA結合ドメインは沢山の非特異 的な疎水的そして静電的/水素結合的な相互作用をDNA の骨格の糖やリン酸基と相互作用している。それは、GI n 381番、Trp 383番、Trp 403番、Ser 404番、Arg 415 番、Ser 417番、Met 419番、Lys 421番、Arg 423番、Th 40 r 426番及びLys 429番である(図3(a))。面白いこ とに、我々はアミノ酸側鎖のコンフォメーションの2つ の状態を見つけた。DNAに結合したTRF1 DNA結合ドメイ ンの20個の計算された構造の中で、Lys 421番ははっ きりとしたコンフォメーションをとっていなくて、G5お よび骨格のリン酸基の間をゆらいでいるように見える。 それを図3(c)に示した。Lys421番の側鎖のシグナル が顕著にその線幅が広がっているのが観測されている が、Lys 421番と同じ分子表面にあってDNAに接している

Arg 425番にはそのような顕著な線幅の広がりが見えて

いないので、Lys 421番は本質的にDNA複合体で動的な性質を持っていることが考えられる。よって、Lys 421番はゆらゆらと揺らいだ水素結合をA4、G5、リン酸骨格と形成していると考えられる。μ秒からミリ秒の時間オーダーのこのような揺らいだ認識は他のDNA結合タンパク質、例えば、TFIIIA (Foster et al., 1997) やアンテナペディアホメオドメイン (Billeter et al., 1993) などでも提案されている。

【0054】特異的な配列における各々の塩基対の役割 今回結合についての構造解析に使用したテロメア結合部 位の各塩基対が寄与していることを確かめるために、我 々はDNA結合ドメインと19種類の異なったDNA分子(こ の19種類は、野生型の13mer配列内で1つ又は2つの 塩基が置換した変異体である)の相互作用を観測した。 これらの解析はNMR、NMRの化学シフトの変化によってな された。図4(a)に示すように、野生型のDNAの結合 部位(wt)とDNA結合ドメインとの結合は非常に強いの で、加えられたタンパク質はDNAのイミノプロトンの化 学シフトをDNA結合型の位置に変化させた。それに対し て、DNA結合部位の4番目の位置をAからTに変化させたD NA (A4T) では、DNA結合ドメインとの強い親和性がなく なって、そのために、DNAイミノプロトンの化学シフト は、タンパク質を徐々に加えると、徐々に変化するだけ である(図4(c))。13merのDNAで、全く異なった 配列を持ったもの (ns13) では、イミノプロトンの化学 シフトはタンパク質を加えていっても、非常に小さい (図4(d))。これらのDNAの配列を変えた結合実験 の結果は図4(e)にまとめてある。タンパク質-DNA 複合体の構造中では、A4の特異的な認識ははっきりとは 見えていないが、A4の位置を変えた2つの変異体(Aか らG、AからTに変えた)では特異的な結合能力がなくな っている。よって、A4はTRF1によって特異的に認識され ていることがわかった。5番目~7番目のGをCに変えた すべての変異体も強い結合能力をなくしている。よっ て、3つのグアニン塩基が並んだこの並び方は、TRF1の DNA結合ドメインがテロメアDNAを認識するときに本質的 である。8番目のTをA、G及びCに変えた3つの変異体や 9番目のTをC及びGに変えた2つの変異体もまた強いDNA 結合能力をなくしている。3番目のTをAに変えた変異 体、9番目のTをAに変えた変異体、及び10番目のAをT に変えた変異体のこれらの3つの変異体(図4(b)) は、わりと強い結合活性を保持しているように見える。 しかしながら、3番目と9番目の両方をAからTに変えた 変異体では、結合能力がなくなっている。構造からは、 A10はどのアミノ酸からも認識されていない。4番目と 10番目を同時にAからTに変えた変異体では、強い結合 活性をなくしているが、A4の位置に比較してA10の位置 はテロメアDNA配列において本質的に重要ではないと思 われる。要約すると、これらの実験の結果、明確に示さ 50 れたのは、A4G5G6G7T8T9配列がTRF1の非常に高い配列特 異的な認識において本質的なコアであることである。こ のことは、今回の構造解析の結果と対応するし、以前の 生化学の実験(Konig et al., 1998, Bianchi et al., 1999) とも対応する。

17

【0055】Mybドメインやホメオドメインとの構造比 較

前にも述べたように、TRF1 DNA結合ドメインの3つのへ リックスの骨格の構造体は、c-Mybの3つのリピートの 骨格の構造体 (Nishikawa et al., 1998) と非常によく 似ている。DNAに結合していない状態のTRF1のDNA結合ド 10 のR2の部分の重ね合わせを示している。TRF1 DNA メインの平均構造の骨格(それは、アミノ酸383番~398 番、403番~409番と417番~426番) とDNAに結合してい ないc-Mybの1番目、2番目及び3番目のリピート及びD NAに結合した状態のc-Mybの2番目及び3番目のリピー トの骨格構造との間の根二乗平均偏差は、それぞれ、1. 17オングストローム、0.97オングストローム、1.05オン グストローム、1.15オングストローム、1.14オングスト ロームである。Rap1pの2つのサブドメインは定型的なM vbドメインの構造とは少し異なっていて、TRF1のDNA結 合ドメインのDNAに結合した状態の骨格原子とRap1pのサ 20 ブドメインD1及びD2の対応する原子との間の根平均二乗 偏差は、それぞれ、1.66オングストロームと1.58オング ストロームである。

【0056】TRF1のDNA結合ドメインのターン2は、c-M vbの3つのリピートの各々の対応するターンよりも2ア ミノ酸長くなっていて、TRF1の3番目のヘリックスはc-Mybの3つのリピートの各々の対応するヘリックスより も少し長くなっている。Rap1pのDNA結合ドメインでは、 1番目のヘリックスと2番目のヘリックスの間のリンカ ーはD1で9アミノ酸で構成されていて、D2では54アミ 30 ノ酸で構成されている。D1やD2のリンカーは、不規則な 構造をとっていて、TRF1の対応するターンよりもかなり 長くなっている。D1の3番目のヘリックスはTRF1の3番 目のヘリックスよりも少し短い。しかし、D2の3番目の ヘリックスは、TRF1の3番目のヘリックスよりも少し長 くて、さらに、D2の場合には、4番目のヘリックスが1 番目と3番目のヘリックスと接触しながら続いている。 ホメオドメインは3つのヘリックスを持っていて、典型 的なHTHモチーフをその2番目と3番目のヘリックスが 構成している。しかしながら、ホメオドメインの3つの 40 ヘリックスの構造は、Mybドメインの構造と比較する と、かなり違っている。TRF1のDNA結合ドメインとホメ オドメインであるアンテナペディアエングレイルド0ct1 及びMatα2との根二乗平均偏差は、DNAに結合した状態 で、それぞれ、2.46、2.45、2.44及び2.50オングストロ ームである (Qian et al., 1989; Fraenkel et al., 19 98; Kissinger et al., 1990; Klemm et al., 1994; Wo lberger et al., 1991)。しかしながら、ホメオドメイ ンの間同士での根二乗平均偏差はかなり小さくて、例え ば、アンテナペディアとエングレイルドOct1及びMat α2 50

ホメオドメインとの間では、それぞれ、0.34、0.75、0. 73オングストロームである。

【0057】TRF1、c-Myb、Rap1p及びホメオドメインの DNA複合体における構造比較

Mybドメイン、ホメオドメイン及びRap1pのDNA結合サブ ドメインは、すべてがDNA結合モチーフであるHTHファミ リーに属しているが、DNAとの相互作用の幾何学的構造 は異なっている。図5(a)は、TRF1 DNA複合体とc-My bの最小のDNA結合ドメインであるR2R3とDNAの複合体中 結合ドメインの配向とR2やR3のDNAに対する配向は非常 によく似ていて、TRF1の3つのヘリックス領域の骨格原 子とタンパク質によって覆われた領域のDNAの骨格原子 を、DNAに結合した状態のR2及びR3の対応した原子と比 較した根二乗平均偏差は、各々、1.42及び1.38オングス トロームである。TRF1 DNA結合ドメインや、c-MybのR2 及びR3の認識へリックスは、DNAの大きな溝の方向にほ とんど平行に配置していて、認識へリックスとDNAのら せん軸との間の角度は、TRF1 DNA結合ドメイン、c-Myb のR2及びR3のDNA複合体について、各々、53.3°、53.1 <sup>°</sup> 及び45.6°である。

【0058】一方、TRF1とDNAの配向は、Rap1pサブドメ インがDNAに結合したときとは異なっていて、それは図 5 (b) に示した。タンパク質によって覆われたDNAの 骨格原子を伴ったTRF1の3つのヘリックスの領域の骨格 の原子とDNAに結合したD1及びD2の対応する原子との間 の根二乗平均偏差は、各々、2.42オングストローム及び 2.50オングストロームである。Rap1pの2つのサブドメ イン中の認識へリックスはDNAのらせん軸に対してほぼ 直角に配置しており、認識へリックスとDNAらせん軸と の角度は、D1及びD2で、各々、80.8°及び83.3°であ

【0059】一般的に、DNA上でのこれらのドメインの 配向は、DNA骨格との非特異的相互作用によって決定さ れている。TRF1 DNA結合ドメインでは、DNAのリン酸骨 格はTrp403番のN ε H、Ser 404番の骨格のNH、Lys 421番 のNくHが一つのDNAの鎖を認識し、さらに、Arg 415番の グアニジノ基とArg 423番のグアニジノ基がもう一つ別 の鎖を同じ面から認識している。これらのアミノ酸は、 c-MybのR2及びR3の両方で保存されている。しかし、Rap 1pの2つのサブドメインのD1及びD2では、TRF1DNA結合 ドメインのTrp 403番、Arg 415番、Lys 421番に対応す る残基は、各々、チロシンまたはフェニルアラニン、ヒ スチジン及びアルギニン残基に置換されている。ヒスチ ジンを除いたこれらの残基は、リン酸骨格には関与して いない。その結果、DNA上でのD1及びD2の配向は、c-Myb の定型的なMybドメインであるR2及びR3やTRF1 DNA結合 ドメインの配向と異なっている。図5(c)で示すよう に、TRF1のDNA複合体をエングレイルドホメオドメイン のDNA複合体と重ね描きした。TRF1のDNA複合体の骨格構

19

造は、エングレイルドホメオドメインとはかなり違って いる。TRF1の3つのヘリックスの領域とタンパク質によ って覆われたDNAの骨格原子の位置とアンテナペディア エングレイルドOct1及びMat α2のホメオドメインの各々 の対応する原子との間の根二乗平均偏差は、3.69オング ストローム、3.72オングストローム、3.78オングストロ ーム及び3.71オングストロームである。

【0060】TRF1のDNA結合ドメインがテロメアDNAにタ ンデムに配置した構造

ヒトのテロメアは、TTAGGG配列モチーフがタンデムに結 10 合した非常に長い構造であるが、それはTRF1やTRF2によ って認識されている。TRF1 DNA結合ドメインのテロメア DNA複合体のNMR構造とDNAの変異体を使った結合実験に よって、TAGGGTT配列が一つのTRF1 DNA結合ドメインに よって認識されることが明らかになった。これらの結果 は、結合部位に関する以前の生化学的な実験(Konig et al., 1998; Bianchi et al., 1999) と非常によく対応 している。今回の構造に基づいて、2つのDNA結合ドメ インがテロメアDNAにタンデムに配置するモデル構造を 構築した。それを図6に示す。このモデルでは、2つの 20 DNA結合ドメインは6塩基対離れていて、2つのドメイ ンはDNAの二重らせんの反対側に位置していて、それ で、立体的な障害が全く生じていない。ここに示した構 造情報に基づくよりも前に、非常によく似たモデルが、 ·フットプリントのデータとTRF1 DNA結合ドメインのモデ ル構造から提案されている (Konig et al., 1998)。TR F1とTRF2のDNA結合ドメインが非常に高い配列相同性持 っている(55%、図1) ことから、両方のDNA結合ド メインともテロメアDNAとのよく似た接触をすると考え ることができる。最近、二量体のTRF1(各々のC末端に 2つのDNA結合ドメインを持っている)が非常に空間的 に自由度を持って2つの結合部位に結合することが示さ れている (Bianchi et al., 1999)。その結果、TRF1に よってDNAの高度の高次構造の変化が引き起こされる。 このことは電子顕微鏡の実験解析からも支持されている (Griffith et al., 1997; Bianchi et al., 1999) o T RF1にはMybドメインが存在するにも関わらず、ここで示 したタンパク質-DNA複合体構造は、TRF1の二量体がc-My bリピートと異なる様式で結合することを示している。c -Mybのリピートでは、R2及びR3からの2つのDNA認識へ リックスは、DNAの大きな溝に密にパックされて、一つ の配列TAACNGを協調的に認識する(Ogata et al., 199 4)。DNAへの結合に伴って、R2とR3は協調的に幅広いプ ラスの表面を形成して、それは負に荷電したDNAリン酸 骨格への結合に必須である。一方、Rap1p DNA結合ドメ イン中の2つのサブドメインD1及びD2は、DNAの大きな 溝でお互いに離れて結合し、各々が別々のGGTGT配列を 認識し、その認識はN末端の腕によって助けられて、そ れで高いDNA結合親和性を与え、そして、ホメオドメイ ンのように長い結合部位を認識している (Konig et a

1., 1996; Taylor et al., 2000)。D1及びD2の両方の サブドメインは、D1とD2の間のリンカー及びD2の後のフ レキシブルなC末端と協調して、DNA複合体中で非常に強 い正電荷の表面を形成している。D1単独では特異的なDN A結合能はなく、また、Rap1pのDNA結合ドメインのD2の 後を欠損すると特異的なDNA結合能がなくなる(Henry e t al., 1990)。よって、この非常に強い広い正電荷の 表面はRap1pの協調的な認識にとって必要である。しか しながら、TRF1の一つのMybドメインだけで試験管内で 配列特異的に結合することができる。図6に示したよう に、TRF1の2つのMybドメインの各々は、独立に非常に 強い正電荷の表面を持っている。このことは、TRF1の2 つのMybドメインが2つの結合部位に非常に極端に空間 的な自由度を持って、しかも協調的ではなく結合するこ とができるということと一致している (Bianchi et a 1.. 1999) .

# · 【0061】<u>実験手法</u>

タンパク質とDNAの調製

ヒトTRF1のDNA結合ドメインは、アミノ酸371番~439番 で、N末端にメチオニンを付加して、ベクターpET13A(Ge rchman et al., 1994)を用いて、大腸菌BL21(DE3)pLysS (Novagen)に大量発現させた。大腸菌を37℃で培養し て、ODco が0.4となったところで、タンパク質発現を誘 導するために1mMのイソプロピルー1-チオーβ-D-ガ ラクトピラノシド (IPTG) を加えた。添加後3時間培養 し、大腸菌を集めて、バッファーA(50 mM Tris-HCl, pH 8.0, 5 mM EDTA, 1mM PMSF, 1mMベンズアミジン及び5% グリセロール)に懸濁した。安定同位体でラベルするた めには、<sup>15</sup> NH<sub>4</sub>C1(0.15%)及び/又は[<sup>13</sup> C]-グルコース (0.2%)を含むM9最小培地を培養に使った。大腸菌は氷 上で超音波で破砕し、遠心して集めた。上清を次の精製 のために使った。DNA結合ドメインはイオン交換クロマ トグラフィー (P11, CM52; Whatman)、ゲル濾過(Super dex 75; Pharmacia)及び疎水 (Phenyl sepharose; Phar macia) カラムクロマトグラフィーを用いて精製した。 サンプルの同定と純度は、MALDI-TOF質量分析法と電気 泳動法によって確認した。

【0062】13merの二重鎖DNA(その配列は、5'-GTTA GGGTTAGGG-3' (配列番号2)) の各々の鎖はBex社から 購入し、50 mMリン酸カリウムバッファー (pH 6.8) 中 で90℃から徐々に温度を下げて両方の鎖を巻き戻し た。試料の純度はゲル濾過によって確認した。DNA結合 ドメインとDNAとの複合体は、タンパク質にDNA溶液を徐 々に等量になるまで加えることによって得た。沈殿物が 出るのを避けるために、タンパク質及びDNAは、100 mM NaClを含有する50 mMリン酸カリウム緩衝液 (pH 6.8) に溶かし、試料の濃度は、混合前には1 mM以下に抑え た。さらに、NMR実験のために、その溶液を濃縮して、3 kDaカットオフメンブレンを持ったcentricon(Amicon)で 塩強度を薄めた。

# 【0063】NMR分光

DNA結合ドメインのDNAフリーの形は、100 mM NaCl及び1 mM NaN₃を含有する50mMリン酸カリウムバッファー (pH 6.8) 中で測定し、DNA結合体は塩がない溶液(pH 6.8) 又は1 mM NaN3 含有5 Mmリン酸カリウムバッファー(pH 6.8)、10% (v/v)又は100% № 0中で測定した。タンパク 質の濃度は両方の試料で1.5-2.5 mMであった。NMR実験 は、DNAフリーのときは300Kで行い、DNA結合体は305 K で行い、Bruker DMX-600及びDRX-500を使った。それら は、三重共鳴グラジエントプローブがついている。そし て、AMX2-500も使った。タンパク質の骨格のシグナルの 帰属は、3次元のHNCA、3次元のHN(CO)CA、3次元のHN CO(Grzesiek and Bax, 1992a)、3次元のCBCANH及び3 次元のCBCA(CO)NH(Grzesiek and Bax, 1992b)から得 た。タンパク質の側鎖の共鳴の帰属は、3次元のHBHA(C 0)NH(Grzesiek and Bax, 1992b)、3次元のC(CO)NH(Grz esiek and Bax, 1993)、3次元のHCCH-TOCSY(Kay et a 1., 1993)、3次元の<sup>15</sup> N編集TOCSY、3次元の<sup>15</sup> N編集NO ESY及び2次元の同核種DQF-COSY、TOCSY及びNOESYの実 験により得た。H β 及びVal/Leuのメチル基の立体特異的 な帰属は、3次元のHNHB(Archer et al., 1991)及びNOE SY実験をともに用いることによって得た。骨格の二面角 φの制限のための³JiNa の結合定数は、3次元のHNHA(V uister and Bax, 1993)実験によって測定した。ゆっく りと交換するアミドのプロトンは、H20中で凍結乾燥し たサンプルをD20中に溶かした後の一連の'H-"N HSQCス ペクトルで得た。DNAの共鳴の帰属及びDNA分子内の距離 制限は、2次元のNOESY、TOCSY及びDQF-COSY(それは、 <sup>13</sup> C又は<sup>13</sup> C/<sup>15</sup> Nのフィルターのパルス法(Ogura et a 1., 1996) を使って得た。分子間の距離の制限は、13 C 編集 (F1) 、<sup>13</sup> Cフィルター (F3) NOESY実験及び<sup>13</sup> N編 集 (F1) 、 15 N/13 Cフィルター (F3) NOESY実験 (Ogura et al., 1996) より得た。すべてのNMRスペクトルは、N MR Pipe(Delaglio et al., 1995)及びPIPP(Gareret et al., 1991)ソフトウェアパッケージを使って解析した。 DNAの滴定実験では、DNA結合ドメインを19種類の13me rDNA分子種に徐々に加えた。その19種の中には、コン トロールとして、野生型の配列、1つ及び2つの塩基対 を置換した配列、及び全く非特異的に結合する配列が含 まれていた。加える量は、0.25モル等量ずつ増加させ た。DNA濃度は、50 mMリン酸カリウムバッファー (pH 6.8) 及び75 mM NaC1中で約0.3 mMであった。塩基対の イミノプロトンの化学シフトの変化は293 Kの 1 次元の' Hスペクトルでモニターした。

#### 【0.064】構造計算

実験的な距離の制限は、NOESYスペクトルのクロスーピークの強度から得た。タンパク質内のNOEは、4つの距離制限に分類した。それは、1.9-3.0オングストローム、1.9-4.0オングストローム、1.9-5.0オングストローム及び1.9-6.0オングストロームで、タンパク質とDNA分 50

子間のNOEは、1.9-3.5オングストローム、1.9-4.5オン グストローム、1.9-5.5オングストローム及び1.9-6.5オ ングストロームに分類し、各々が、強い、中程度、弱 い、非常に弱いNOEに対応している。DNA分子内のNOE は、5つの距離制限に分類し、それは、1.8-2.5オング ストローム、2.3-3.5オングストローム、2.3-4.0オング ストローム、2.5-5.0オングストローム及び3.0-6.0オン グストロームであり、各々が、強い、中程度の強い、中 程度、弱い、非常に弱いNOEに対応している。擬原子補 正は、その上限に適用した。タンパク質骨格内の水素結 合の制限は、化学シフトとNOEの連続性を考慮して交換 がゆっくりとしたプロトンに適用した。DNA内での水素 結合の制限は塩基対を保持するために用いた。実験的な ねじれ角の制限は、3Jma の結合定数から得て、3Jma <5.5のとき、-90° < φ < -40° で、³J<sub>™</sub>。 >8.5のと き、-160° < ø < -80° であった。DNAの骨格のねじれ角 に関して、DNAのAフォームとBフォームをカバーするよ うな非常に弱いねじれ角の制限が右巻きのリン酸骨格を 維持するために適用されていた。それは、局所的な鏡像 のコンフォメーションを排除している。 $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ 、 $\epsilon$ 及びくのねじれ角は、各々、-65° ±50°、175° ±50 °、70°±50°、-170°±50°及び-100°±50°に制限 されていた (Saenger, 1984)。上記の距離及びねじれ 角の制限を使って、DNA結合ドメインのDNAに結合してい ない状態とDNAに結合した状態の両方で3次元構造を、 4次元のシュミレイテッドアニーリング(4D-SA)プロ グラムEMBOSS(Nakai et al., 1993)を用いて得た。DNA に結合していない状態のときには、計算は100個のラ ンダムな構造体から出発して、NOEから得られた距離の 30 制限、角度制限及び水素結合制限を入れて計算した。4 次元のシュミレイテッドアニーリングの12,000ス テップを行い、さらに、AMBERの全原子分子力場を用い て、共役勾配エネルギー最小化法を3,000ステップ 使った。静電的なエネルギーは、誘電率2rij(ここで、 rii は非結合原子iとiの間の距離を表している)を含ん でいる。100の構造体から25が構造の最終セットと して選ばれて、それは距離の制限が0.3オングストロー ム以内で、角度の制限が5°以内に入っている。DNAに 結合した状態は、最初、25個のDNA結合ドメインの構 造をフリーフォームのときと全く同様にタンパク質内の 制限だけで計算した。5個の最も適したタンパク質の構 造を選び、次のDNAとのドッキングに使った。次に、DNA 結合ドメインと理想的な13mer二重鎖DNAのB型構造を4 次元シュミレイテッドアニーリングの12,000ステ ップでドッキングした。そのときには、DNAの分子内の 制限と分子間の制限、それに、タンパク質内の制限を用 いた。このステップの初期構造は、前のステップで計算 したDNA結合ドメインと典型的なBフォームのDNAを5つ の異なる配向に置いて、お互いが50オングストローム離 れたところから始めた。次に、各々の結合した構造は、

9,000ステップのシュミレイテッドアニーリングを さらに行い、さらに、5,000ステップの共役勾配工 ネルギー最適化法を前に述べたのと同じ方法で行った。 最終的に、20個の構造が選ばれて、それらはすべて、 - 距離の制限が0.3オングストローム以内、角度の制限が 5°以内であった。

\*【0065】表1

TRF1 DNA結合ドメインとDNA複合体のパラメータの数と 構造統計

[0066]

【表1】

4	۰

Number of experime	ntal restraints			
	TRF1-	DNA	TRF1	
Protein			,	•
Distance restraint	.s 901		888	
intraresidue		156	203	
sequential ( i-j		263	237	
short range ([i-		273	242	
long range ( i-		209 .	206	
Dihedral restraint	-			
_ <b></b> φ	29		28	
DNA			•	
Distance restraint	:s <sup>a</sup> 356	440		•
intraresidue	-1)	149		
sequential ( i-j	<del>-</del>  }	191		
interstrand Protein-DNA	55	16		
rrotein-uwa Total	1341		916	
I Due I	1941		810	
R.M.S.Deviation for	rom experimental rest	raints		
	<sa>b</sa>	<sa>,</sa>	<sa></sa>	<sa>,</sa>
Distance(Å)	0.011 <u>+</u> 0.001	0.011	$0.005 \pm 0.001$	0.004
Dihedral(°)	0.261 ± 0.353	0.158	0.031 ± 0.091	0.000
R.M.S.Deviation for	rom Idealized geometr	У		
Bonds(Å)	$0.005 \pm 0.000$	0.005	$0.005 \pm 0.000$	0.005
Angle(* )	1.661 ± 0.045	1.619	1.509 ± 0.045	1.514
Impropers(°)	2.322 ± 0.334	2.195	1.837 ± 0.430	1.560
Energetics(kcal/m			•	
E <sub>L-d</sub> ·	-882.2 ± 7.221	-889.8	$-392.0 \pm 7.835$	-383.8
R.M.S.Deviations	from mean coordinate	,		
D	(backbone / all hea			
Protein° DNAd	$0.50 \pm 0.06 / 1.1$		0.46 ± 0.05 / 1.06	± 0.05
Protein+DNA	0.66 ± 0.08 / 0.7 0.65 + 0.04 / 0.9			
	_	/ ± U.U6		
Ramachandran plot				
Residues in favor		. 8	79.7	
		1.3	15.2	
		.0	4.9	
an sallow	ed regions 0	0.0	0.2	

a 水素結合の制限及び環と環の制限は 4 次元シュミレイ テッドアニーリングにおいてさらに追加されており、そ れは塩基対の平面性を保っている。b<SA>はNMRの最終 構造に対する平均値を示していて、<SA>、は最適化した 40 e PROCHECK-NMR(Laskowski et al., 1996)

平均構造を示している。 c 残基380番~429番はDNA複合 ※

※体中で重ね描きされ、DNAフリーのときの残基383番~42 9番で重ね描きされている。 d 塩基対1-11 (3'-13') が重ね描きされている。

[0067]

· テロメアDNAに結合したヒトTRF1(Thr 371-Lys 429)の三次元構造座 標(データは20構造分ある、原子の番号付けはPDBの書式に従った。)。 HEADER 000000

REMARK	0.00531	1.69591	0.02560	0.01792	3.10332	1.73272
0.00000						
REMARK	2 82854	0.22293	0 48797	1 18621	0.93142	

	25				(14)				付用 C U	U
REMARK	25	0.01	132	0.00364	0.00657	0.018	47 0.	01323	26	
REMARK	0		130	125	5		0	0	(	)
REMARK	J	1	.378	305	460	2'	73	340		
REMARK		0.03	3685	0.18541	0.03573	0.041	04 0.	18541	0.10610	)
REMARK		5.78	3567	0.36906						
REMARK	0		2	1	0		1 .	0	(	)
ATOM	1	N	GLU	1	8.604 -1	2 891	28.906	1.00	0.00	
ATOM	2	CA	GLU	1	7.354 -1		29.255	1.00	0.00	
ATOM	3	CB	GLU	1	7.107 -1		28.316	1.00	0.00	
ATOM	4	CG	GLU	1	8.373 -1		28.047	1.00	0.00	
ATOM	5	CD	GLU	1			29.327	1.00	0.00	
ATOM	6		GLU	1	9.981 -1		29.682	1.00	0.00	
ATOM	7		GLU	1	8.822 -		29.948	1.00	0.00	
ATOM	8	С	GLU	1	6.190 -1		29.291	1.00	0.00	
ATOM	9	0	GLU	1	6.410 -1		29.629	1.00	0.00	
ATOM	10	N	LYS	2	4.973 -1	2.737	28.955	1.00	0.00	
ATOM	11	CA	LYS	2	3.751 -1	3.532	28.915	1.00	0.00	
ATOM	12	CB	LYS	2	2.992 -1	3.454	30.253	1.00	0.00	
ATOM	13	CG	LYS	2	3.760 -1	3.989	31.471	1.00	0.00	
ATOM	14	CD	LYS	2	3.977 -1	5.509	31.400	1.00	0.00	
ATOM	15	CE	LYS	2	4.955 ~1	6.013	32.468	1.00	0.00	
ATOM	16	NZ	LYS	2	6.303 -1	5.440	32.286	1.00	0.00	
ATOM	17	C	LYS	2	2.876 -1		27.785	1.00	0.00	
ATOM	18		LYS	2	2.768 -1		27.628	1.00	0.00	
ATOM	19		HIS	3	2.264 -1		27.010	1.00	0.00	
ATOM	20		HIS	3	1.389 -1		25.880	1.00	0.00	
ATOM	21		HIS	3	2.129 -1		24.805	1.00	0.00	
ATOM	22		HIS	3	1.474 -1					
ATOM	23		HIS	3	0.139 -1					
ATOM	24		HIS	3	-0.111 -1		21.927	1.00		
ATOM	25		HIS	3	0.964 -		21.239	1.00		
ATOM	26		HIS	3	1.961 -		22.201	1.00		
ATOM	27		HIS	3 3	0.903 -: -0.284 -:		25.316	1.00		
ATOM	28 29		HIS ARG	4	1.850 -		<ul><li>25.369</li><li>24.782</li></ul>	1.00		
ATOM ATOM	30		ARG	4	1.630 -		24.782	1.00		
ATOM	31		ARG	4	1.030 -		22.711	1.00		
ATOM	32		ARG	4	0.970 -		21.989	1.00		
ATOM	33		ARG	4	-0.239 -		22.560	1.00		
ATOM	34		ARG	4	-0.465 -		21.863	1.00		
ATOM	35		ARG	4	-1.261 -		20.798	1.00		
ATOM	36		ARG	4	-1.452 -		20.373	1.00		
ATOM	37		ARG	4	-1.864 -		20.162	1.00		
ATOM	38		ARG	4	2.897 -		24.363	1.00		

```
27
             0
ATOM
         39
                  ARG
                          4
                                  2.812 -19.014 24.744 1.00 0.00
ATOM
         40
             N
                  ALA
                          5
                                  4.062 -17.238 24.092 1.00
                                                                0.00
ATOM
         41
             CA
                  ALA
                          5
                                  5.397 -17.819
                                                  24.186
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                          5
         42
             CB
                  ALA
                                  5.637 -18.517
                                                  25.532
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         43
             C
                  ALA
                          5
                                  5.689 -18.736
                                                  22.998
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             0
         44
                  ALA
                          5
                                  4.768 -19.200
                                                  22.331
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         45
             N
                  ARG
                          6
                                  6.984 -18.976
                                                  22.741
                                                         1.00
                                                                 0.00
ATOM
             CA
                  ARG
                          6
                                  7.483 -19.796
                                                  21.642 1.00
         46
                                                                 0.00
ATOM
         47
             CB
                  ARG
                          6
                                  7.036 -21.262
                                                  21.771
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             CG
                  ARG
                          6
                                  7.512 -21.888
                                                  23.087
         48
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         49
             CD
                  ARG
                          6
                                   7.087 -23.358
                                                  23.150
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             NE
                  ARG
                          6
                                  7.505 -23.977
                                                  24.416
         50
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
              CZ
                  ARG
                          6
                                  7.180 -25.222
                                                  24.803
         51
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             NH1 ARG
                                   6.439 -26.006
                                                  24.008
         52
                          6
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             NH2 ARG
                                   7.598 -25.679
                                                  25.989
         53
                          6
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         54
             C
                  ARG
                          6
                                   7.045 -19.169
                                                  20.319
                                                          1.00 0.00
ATOM
         55
             0
                  ARG
                          6
                                   6.009 - 19.541
                                                  19.773
                                                          1.00
                                                                 0.00
                          7
ATOM
         56
             N
                  LYS
                                   7.837 -18.205
                                                  19.824
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         57
              CA
                  LYS
                          7
                                   7.556 -17.477
                                                  18.593
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CB
                          7
ATOM
         58
                  LYS
                                   8.765 -16.623
                                                  18.169
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
          59
              CG
                  LYS
                          7
                                   8.598 -16.070
                                                  16.741
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CD
                  LYS
                          7
         60
                                   9.591 -14.954
                                                  16.386
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         61
              CE
                  LYS
                          7
                                                  16.990
                                   9.249 -13.583
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              NZ
                  LYS
                          7
         62
                                   7.920 -13.099 16.572
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C
                          7
ATOM
         63
                  LYS
                                   7.075 - 18.401
                                                  17.470
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              0
                  LYS
                          7
                                   7.696 - 19.426
         64
                                                  17.189
                                                           1.00
                                                                 0.00
             N
                  ARG
ATOM
         65
                          8
                                   5.967 -18.007
                                                  16.837
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CA
                  ARG
         66
                          8
                                   5.334 - 18.706
                                                  15.732
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         67
              CB
                  ARG
                          8
                                   4.138 -17.864
                                                  15.266
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
          68
              CG
                  ARG
                                   3.581 -18.268
                                                  13.898
                          8
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         69
              CD
                  ARG
                          8
                                   2.379 -17.393
                                                  13.524
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         70
              NE
                  ARG
                          8
                                   1.130 -17.878
                                                  14.126
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         71
              CZ
                  ARG
                                  -0.061 -17.284
                                                  13.945
                          8
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
          72
              NH1 ARG
                                  -1.151 -17.729
                                                  14.582
                          8
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
          73
              NH2 ARG
                                  -0.172 -16.218
                                                  13.147
                                                           1.00
                          8
                                                                 0.00
              C
ATOM
          74
                  ARG
                                   6.359 - 18.924
                                                  14.616
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              0
                                                  14.251
          75
                  ARG
                          8
                                   7.091 -18.004
                                                           1.00
                                                                 0.00
          76
              N
                  GLN
                                   6.409 -20.148
ATOM
                                                  14.081
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CA
                  GLN
          77
                                   7.343 -20.514
                                                  13.030
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          9
ATOM
          78
              CB
                  GLN
                          9
                                   7.491 -22.048
                                                  12.974
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CG
                                   6.221 -22.755
ATOM
          79
                  GLN
                          9
                                                  12.476
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
          80
              CD
                  GLN
                          9
                                   6.248 -24.269
                                                   12.661
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              OE1 GLN
                                   7.218 -24.928
                                                  12.297
          81
                          9
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
          82
              NE2 GLN
                          9
                                   5.168 -24.833
                                                   13.198
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C
ATOM
          83
                  GLN
                          9
                                   6.893 -19.940
                                                  11.684
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              0
                  GLN
                                   5.772 -20.186
          84
                          9
                                                  11.250
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
          85
              N
                  ALA
                          10
                                   7.775 -19.193
                                                   11.014
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                   7.522 -18.644
ATOM
          86
              CA
                  ALA
                          10
                                                    9.688
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
          87
              CB
                  ALA
                          10
                                   8.253 -17.310
                                                    9.525
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             С
                  ALA
                                   8.056 -19.697
          88
                          10
                                                    8.719 1.00 0.00
```

					(10)			付用とし
	29							30
ATOM	89	0	ALA	10	9.166 -20.181	8.937	1.00	0.00
ATOM	90	N	TRP	11	7.308 -20.081	7.675	1.00	0.00
ATOM	91	CA	TRP	11	7.817 -21.105	6.771	1.00	0.00
ATOM	92	CB	TRP	11	6.786 -21.523	5.725	1.00	0.00
ATOM	93	ÇG	TRP	11	5.627 -22.385	6.129	1.00	0.00
ATOM	94	CD1	TRP	11	4.747 -22.173	7.130	1.00	0.00
ATOM	95	NE1	TRP	11	3.816 -23.194	7.171	1.00	0.00
ATOM	96	CE2	TRP	11	4.059 -24.129	6.185	1.00	0.00
ATOM	97	CZ2	TRP	11	3.427 -25.326	5.805	1.00	0.00
ATOM	98	CH2	TRP	11	3.940 -26.058	4.724	1.00	0.00
ATOM	99	CZ3	TRP	11	5.068 -25.586	4.037	1.00	0.00
ATOM	100	CE3	TRP	11	5.691 -24.389	4.420	1.00	0.00
ATOM	101	CD2	TRP	11	5.209 -23.631	5.505	1.00	0.00
ATOM	102	C	TRP	11	9.074 -20.614	6.044	1.00	0.00
ATOM	103	0	TRP	11	9.152 -19.450	5.648	1.00	0.00
ATOM	104	N	LEU	12	10.043 -21.516	5.863	1.00	0.00
ATOM	105	CA	LEU	12	11.299 -21.255	5.167	1.00	0.00
ATOM	106	CB	LEU	12	12.492 -21.740	6.009	1.00	0.00
ATOM	107	CG	LEU	12	12.623 -21.014	7.361	1.00	0.00
ATOM	108		LEU	12	11.962 -21.809	8.494	1.00	0.00
ATOM	109		LEU	12	14.103 -20.816	7.707	1.00	0.00
ATOM	110	C	LEU	12	11.279 -21.983	3.822	1.00	0.00
ATOM	111	0	LEU	12	10.426 -22.842	3.599	1.00	0.00
ATOM	112	N	TRP	13	12.225 -21.669	2.920	1.00	0.00
ATOM	113	CA	TRP	13	12.297 -22.341	1.623	1.00	0.00
ATOM	114	CB	TRP	13	13.395 -21.806-	0.709	1.00	0.00
ATOM	115	CG	TRP	13	14.714 -21.549	1.353	1.00	0.00
ATOM	116	CD1	TRP	13	15.132 20.303	1.592	1.00	0.00
ATOM	117	NE1	TRP	13	16.371 -20.311	2.194	1.00	0.00
ATOM	118	CE2	TRP	13	16.816 -21.607	2.374	1.00	0.00
ATOM	119	CZ2	TRP	13	17.987 -22.144	2.929	1.00	0.00
ATOM	120	CH2	TRP	13	18.151 -23.537	2.969	1.00	0.00
ATOM	121	CZ3	TRP	13	17.146 -24.374	2.456	1.00	0.00
ATOM	122	CE3	TRP	13	15.976 -23.826	1.899	1.00	0.00
ATOM	123	CD2	? TRP	13	15.773 -22.429	1.842	1.00	0.00
ATOM	124	C	TRP	13	12.505 -23.832	1.768	1.00	0.00
ATOM	125	0	TRP	13	12.251 -24.551	0.817	1.00	0.00
ATOM	126	N	GLU	14	12.962 -24.337	2.910	1.00	0.00
ATOM	127	CA	GLU	14	13.094 -25.780	3.005	1.00	0.00
ATOM	128	CB	GLU	14	13.796 -26.172	4.309	1.00	0.00
ATOM	129	CG	GLU	14	14.104 -27.671	4.336	1.00	0.00
ATOM	130	CD	GLU	14	14.962 -28.027	5.543	1.00	
ATOM	131	0E1	GLU	14	14.364 -28.371	6.584		
ATOM	132		2 GLU	14	16.200 -27.935	5.400		
ATOM	133	C	GLU	14	11.690 -26.367	2.845		
ATOM	134		GLU		11.451 -27.184	1.960		
ATOM	135		GLU		10.762 -25.899	3.679		
ATOM	136		GLU		9.373 -26.303	3.667		
ATOM	137		GLU		8.680 -25.693	4.886		
ATOM	138	CG	GLU	15	9.332 -26.046	6.228	1.00	0.00

**ATOM** 139 CDGLU 15 **ATOM** 140 OE1 GLU 15 ATOM 141 OE2 GLU 15 ATOM 142 C GLU 15 ATOM 143 0 GLU 15 ATOM 144 N **ASP** 16 ATOM 145 CA ASP 16 ATOM 146 CB ASP 16 **ATOM** 147 CG ASP 16 ATOM 148 OD1 ASP 16 ATOM 149 OD2 ASP 16 ATOM 150 C **ASP** 16 ATOM 151 0 ASP. 16 ... N LYS ATOM 152 17 ATOM 153 CA LYS 17 CBLYS ATOM 154 17 CG LYS ATOM 155 17 CD LYS ATOM 156 17 CE LYS 15.022 -25.303 -2.5330.00 ATOM 157 17 1.00 NZ LYS 17 15.090 -24.750 -1.1651.00 0.00 ATOM 158 C LYS 10.173 -26.657 -1.961ATOM 159 17 1.00 0.00 0 LYS 9.802 -27.122 -3.040ATOM 160 17 1.00 0.00 ATOM N ASN 10.249 -27.398 -0.8431.00 0.00 161 18 ATOM 162 CA ASN 18 9.876 -28.809 -0.8071.00 0.00 ATOM CBASN 10.146 -29.375 0.590 1.00 0.00 163 18 0.00 **ATOM** CG ASN 9.693 -30.820 0.725 1.00 164 18 ATOM 165 OD1 ASN 10.094 -31.667 -0.066 1.00 0.00 18 ATOM 166 ND2 ASN 8.868 -31.103 1.733 1.00 0.00 18 C ASN 8.399 -28.969 ATOM 167 18 -1.1871.00 0.00 168 0 ASN 8.053 -29.862 ÷1.957 1.00 0.00 ATOM 18 ATOM 169 N LEU 19 7.534 - 28.095-0.6611.00 0.00 CA 6.105 -28.088 ATOM 170 LEU 19 -0.9351.00 0.00 CBLEU 5.408 -27.021 -0.0781.00 0.00 ATOM 171 19 ATOM 172 CG LEU 19 3.900 -26.886 -0.3361.00 0.00 ATOM 173 CD1 LEU 19 3.155 -28.202 -0.1041.00 0.00 CD2 LEU 3.324 -25.805 0.586 1.00 0.00 ATOM 174 19 ATOM 175 C LEU 5.875 -27.859 -2.4271.00 0.00 19 ATOM 176 0 LEU 19 5.125 -28.608 -3.044 1.00 0.00 6.526 -26.845 ATOM 177 N ARG 20 -3.0121.00 0.00 ARG 6.411 - 26.540ATOM 178 CA 20 -4.434 1.00 0.00 CBARG 7.271 -25.318 -4.777ATOM 179 20 1.00 0.00 CG ARG 7.092 -24.901 -6.2420.00 ATOM 180 20 1.00 ATOM 181 CDARG 20 7.506 - 23.438-6.4381.00 0.00 NE ARG 7.204 -22.980 ATOM 182 20 -7.8031.00 0.00 CZARG 7.253 -21.700 -8.2120.00 ATOM 183 20 1.00 -7.375ATOM 184 NH1 ARG 20 7.656 - 20.7341.00 0.00 6.891 -21.386 ATOM 185 NH2 ARG 20 -9.463 1.00 0.00 ATOM 186 C ARG 6.766 - 27.780-5.2581.00 0.00 20 ATOM 187 0 ARG 20 6.044 - 28.136-6.1921.00 0.00

31

ATOM

188 N SER

7.860 -28.461

-4.888 1.00 0.00

```
33
                                                                   34
ATOM
        189 CA
                 SER
                         21
                                  8.245 -29.700 -5.545 1.00 0.00
ATOM
        190
             CB
                 SER
                         21
                                  9.545 -30.267 -4.954
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        191 OG
                 SER
                         21
                                 10.653 -29.805
                                                 -5.700
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        192 C
                 SER
                         21
                                  7.084 -30.688 -5.409
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        193
             0
                 SER
                         21
                                  6.643 -31.235
                                                 -6.411
                                                         1.00
                                                                0.00
                                                         1.00
ATOM
        194
             N
                 GLY
                         22
                                  6.582 -30.898 -4.189
                                                                0.00
ATOM
        195
             CA
                 GLY
                         22
                                  5.464 -31.789 -3.905
                                                         1.00
                                                                0.00
                 GLY
ATOM
        196
             C
                         22
                                  4.279 -31.537 -4.839
                                                         1.00
                                                                0.00
             0
                 GLY
ATOM
        197
                         22
                                  3.755 -32.474 -5.435
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        198
             N
                 VAL
                         23
                                  3.874 -30.271 -4.974
                                                         1.00
                                                                0.00
                 VAL
                                                                0.00
ATOM
        199
             CA
                         23
                                  2.778 -29.842
                                                 -5.830
                                                         1.00
ATOM
        200
             CB
                 VAL
                         23
                                  2.593 -28.316
                                                 -5.706
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        201
             CG1 VAL
                         23
                                  1.688 -27.755
                                                 -6.813
                                                               0.00
                                                         1.00
ATOM
        202
             CG2 VAL
                         23
                                  2.023 -27.951
                                                 -4.326
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        203
             C
                 VAL
                         23
                                  3.026 -30.274
                                                 -7.278
                                                                0.00
                                                         1.00
ATOM
        204
             0
                  VAL
                                  2.124 -30.791 -7.932
                                                         1.00
                         23
                                                                0.00
ATOM
        205
             N
                  ARG
                         24
                                  4.242 -30.057 -7.791
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        206
             CA
                 ARG
                                  4.572 -30.411 -9.168
                                                          1.00
                                                                0.00
                         24
ATOM
             CB
                  ARG
                                  5.814 -29.626 -9.611
                                                          1.00
        207
                         24
                                                                0.00
ATOM
        208
             CG
                 ARG
                         24
                                  6.231 -29.975 -11.050
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        209
             CD
                  ARG
                                  6.819 -28.766 -11.783
                                                          1.00
                                                                0.00
                         24
ATOM
        210
             NE
                 ARG
                         24
                                  5.751 -27.817 -12.118
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        211
             CZ
                  ARG
                                  5.877 -26.701 -12.850
                                                          1.00
                                                                0.00
                         24
ATOM
        212
             NH1 ARG
                         24
                                  7.075 -26.323 -13.315
                                                          1.00
                                                                0.00
             NH2 ARG
ATOM
        213
                         24
                                  4.788 -25.970 -13.113
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         214
             C
                  ARG
                         24
                                  4.725 -31.921 -9.402
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             0
                  ARG
                                  4.302 -32.416 -10.443
         215
                         24
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         216
             N
                  LYS
                         25
                                  5.343 -32.651
                                                 -8.468
                                                          1.00
                                                                0.00
             CA
                 LYS
                                  5.590 -34.082
                                                 -8.605
ATOM
         217
                         25
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         218
              CB
                 LYS
                         25
                                  6.780 - 34.515
                                                 -7.726
                                                          1.00
                                                                0.00
              CG
ATOM
         219
                 LYS
                         25
                                  8.170 -34.182
                                                 -8.299
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         220
              CD
                  LYS
                         25
                                  8.619 -32.745
                                                 -8.015
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         221
              CE
                 LYS
                         25
                                 10.045 -32.489
                                                 -8.511
                                                          1.00
                                                                0.00
              NZ
                 LYS
                         25
ATOM
         222
                                 10.454 -31.091
                                                 -8.272
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         223
             C
                  LYS
                                  4.375 -34.957
                                                  -8.279
                         25
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         224
             0
                  LYS
                         25
                                  4.263 -36.038
                                                  -8.854
                                                          1.00
                                                                0.00
             N
                  TYR
                                                 -7.351
ATOM
         225
                         26
                                  3.503 - 34.537
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         226
              CA
                  TYR
                         26
                                  2.359 -35.336
                                                  -6.910
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         227
              CB
                 TYR
                         26
                                  2.648 -35.852
                                                  -5.491
                                                          1.00
                                                                0.00
                  TYR
ATOM
         228
              CG
                         26
                                  4.054 -36.374
                                                  -5.272
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         229
              CD1 TYR
                         26
                                  4.522 - 37.482
                                                  -6.002
                                                          1.00
                                                                0.00
              CE1 TYR
ATOM
         230
                         26
                                  5.829 -37.961
                                                  -5.800
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         231
              CZ TYR
                         26
                                  6.668 - 37.333
                                                  -4.864
                                                          1.00
                                                                0.00
              OH TYR
ATOM
         232
                                  7.937 -37.793
                                                  -4.660
                                                          1.00
                         26
                                                                0.00
ATOM
         233
              CE2 TYR
                         26
                                  6.201 - 36.229
                                                  -4.133
                                                          1.00
                                                                0.00
 ATOM
              CD2 TYR
                                   4.898 -35.750 -4.335
         234
                         26
                                                          1.00
                                                                0.00
 ATOM
         235
              C
                  TYR
                         26
                                  1.014 -34.602
                                                 -6.943
                                                          1.00
                                                                0.00
         236
                  TYR
                                  0.056 - 35.086
 ATOM
              0
                         26
                                                  -6.341
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         237
              N
                  GLY
                         27
                                  0.928 - 33.458
                                                  -7.629
                                                          1.00
                                                                0.00
 ATOM
         238
              CA GLY
                         27
                                  -0.305 -32.695 -7.741 1.00 0.00
```

```
35
                                                                    36
ATOM
        239
             C
                  GLY
                         27
                                  -0.529 -31.775 -6.540
                                                          1.00 0.00
ATOM
        240
             0
                  GLY
                         27
                                  -0.108 -32.076
                                                  -5.426
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        241
             N
                  GLU
                         28
                                  -1.198 -30.644
                                                  -6.785
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        242
             CA
                  GLU
                         28
                                  -1.509 -29.610
                                                  -5.808
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        243
             CB
                  GLU
                         28
                                  -2.164 -28.426
                                                  -6.540
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        244
              CG
                  GLU
                         28
                                  -2.307 -27.187
                                                   -5.657
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        245
             CD
                  GLU
                         28
                                  -2.910 -26.030
                                                   -6.443
                                                           1.00
                                                                  0.00
              OE1 GLU
                                  -2.141 -25.165
                                                   -6.917
ATOM
        246
                         28
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        247
              OE2 GLU
                         28
                                  -4.153 -25.996
                                                   -6.555
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                                                  0.00
ATOM
              C
                  GLU
                                  -2.337 -30.155
                                                   -4.642
                                                           1.00
        248
                         28
ATOM
        249
             0
                  GLU
                          28
                                  -1.802 -30.361
                                                   -3.553
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        250
              N
                  GLY
                          29
                                  -3.633 -30.389
                                                   -4.867
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        251
              CA
                  GLY
                          29
                                  -4.581 -30.901
                                                   -3.885
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        252
              C
                  GLY
                          29
                                  -4.369 -32.382
                                                   -3.566
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        253
              0
                  GLY
                          29
                                  -5.281 -33.190
                                                   -3.732
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         254
              N
                  ASN
                          30
                                  -3.165 -32.736
                                                   -3.104
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         255
              CA
                  ASN
                          30
                                  -2.752 -34.087
                                                   -2.740
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         256
              CB
                  ASN
                          30
                                  -2.118^{\circ} -34.781
                                                   -3.951
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         257
              CG
                  ASN
                          30
                                  -3.085 -34.986
                                                   -5.112
                                                           1.00
                                                                  0.00
              OD1 ASN
ATOM
         258
                          30
                                  -3.733 - 36.028
                                                   -5.192
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         259
              ND2 ASN
                          30
                                  -3.150 -34.025
                                                   -6.031
                                                           1.00
                                                                  0.00
              С
                  ASN
                                  -1.738 -33.972
ATOM
         260
                          30
                                                   -1.601
                                                           1.00
                                                                  0.00
         261
              0
                  ASN
                          30
                                  -0.652^{\circ} -34.551
                                                   -1.644
                                                                  0.00
ATOM
                                                           1.00
ATOM
         262
              N
                  TRP
                                  -2.096 -- 33.194
                                                   -0.578
                          31
                                                           1.00
                                                                  0.00
              CA
ATOM
         263
                  TRP
                          31
                                  -1.248 -32.920
                                                    0.574
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              CB
                  TRP
                                  -1.842 -31.797
         264
                          31
                                                    1.441
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         265
              CG
                  TRP
                          31
                                  -2.636 -30.820
                                                    0.628
                                                           1.00
                                                                  0.00
              CD1 TRP
ATOM
         266
                          31 -
                                  -3.984 -30.799
                                                    0.530
                                                           1.00
                                                                  0.00
              NE1 TRP
ATOM
         267
                          31
                                  -4.373 - 29.801
                                                   -0.333
                                                           1.00
                                                                  0.00
              CE2 TRP
                                  -3.283 -29.120
ATOM
         268
                          31
                                                   -0.834
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              CZ2 TRP
                                  -3.157 -28.052
         269
                          31
                                                   -1.732
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                                   -2.056
ATOM
         270
              CH2 TRP
                          31
                                  -1.879 -27.579
                                                           1.00
                                                                  0.00
              CZ3 TRP
ATOM
         271
                          31
                                  -0.742 -28.174
                                                   -1.483
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         272
              CE3 TRP
                          31
                                  -0.880 - 29.250
                                                   -0.586
                                                           1.00
                                                                  0.00
              CD2 TRP
                                                   -0.236
ATOM
         273
                          31
                                  -2.154 - 29.750
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C
                  TRP
                                  -0.887 -34.202
                                                    1.322
ATOM
         274
                          31
                                                           1.00
                                                                  0.00
              0
                  TRP
ATOM
         275
                          31
                                   0.197 - 34.285
                                                    1.893
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         276
              N
                  SER
                          32
                                  -1.763 -35.216
                                                    1.291
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              CA
                  SER
                          32
                                  -1.507 -36.507
                                                           1.00
                                                                  0.00
         277
                                                    1.911
ATOM
         278
              CB
                  SER
                          32
                                  -2.730 -37.419
                                                    1.765
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         279
              0G
                  SER
                          32
                                  -3.148 -37.502
                                                    0.415
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  SER
ATOM
         280
              C
                          32
                                   -0.280 -37.130
                                                    1.246
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         281
              0
                  SER
                          32
                                   0.696 - 37.464
                                                    1.918
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
                  LYS
                                   -0.327 -37.266
         282
              N
                          33
                                                   -0.086
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         283
              CA
                  LYS
                          33
                                   0.768 - 37.815
                                                   -0.867
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         284
              CB
                  LYS
                          33
                                   0.453 - 37.798
                                                   -2.369
                                                            1.00
                                                                  0.00
              CG LYS
                          33
                                   -0.813 -38.591
                                                   -2.739
 ATOM
         285
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
              CD LYS
                                   -0.735 -39.149
                                                   -4.171
                                                                  0.00
         286
                          33
                                                            1.00
 ATOM
         287
              CE LYS
                          33
                                   -0.538 -38.073
                                                   -5.252
                                                           1.00
                                                                  0.00
              NZ LYS
 ATOM
         288
                          33
                                   -1.765 -37.765 -6.004 1.00
                                                                  0.00
```

```
37
                                                                   38
ATOM
        289 C
                 LYS
                         33
                                  2.042 -37.023 -0.576 1.00 0.00
ATOM
        290
             0
                 LYS
                         33
                                  3.071 -37.617
                                                  -0.271
                                                                0.00
                                                          1.00
ATOM
        291 N
                 ILE
                         34
                                  1.973 -35.689
                                                  -0.656
                                                                0.00
                                                          1.00
ATOM
        292
            CA
                 ILE
                         34
                                  3.114 -34.818
                                                  -0.394
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        293
             CB ILE
                         34
                                 2.719 -33.341
                                                 -0.585
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        294
             CG2 ILE
                                  3.857 -32.413
                                                  -0.132
                         34
                                                          1.00
                                                                0.00
             CG1 ILE
ATOM
        295
                         34
                                  2.380 -33.084
                                                 -2.067
                                                                0.00
                                                          1.00
ATOM
        296
             CD1 ILE
                                  1.745 -31.713
                                                 -2.325
                                                          1.00
                                                                0.00
                         34
ATOM
        297
             C
                 ILE
                         34
                                  3.720 -35.118
                                                   0.985
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        298
             0
                 ILE
                         34
                                   4.933 -35.275
                                                   1.087
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        299
             N
                 LEU
                         35
                                  2.894 -35.212
                                                          1.00
                                                   2.036
                                                                0.00
ATOM
        300 CA
                 LEU
                         35
                                  3.342 -35.510
                                                   3.394
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CB
                 LEU
ATOM
        301
                         35
                                  2.173 -35.393
                                                   4.385
                                                          1.00
                                                                0.00
                                  1.776 -33.936
ATOM
        302
             CG
                 LEU
                         35
                                                   4.670
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        303
             CD1 LEU
                         35
                                  0.362 - 33.881
                                                   5.256
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        304
             CD2 LEU
                         35
                                   2.746 -33.272
                                                   5.656
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        305
             C
                  LEU
                         35
                                   3.971 -36.904
                                                   3.486 1.00 0.00
ATOM
        306
             0
                 LEU
                         35
                                   4.921 -37.107
                                                   4.242 1.00
                                                                0.00
ATOM
             N
                 LEU
                                   3.459 -37.880
        307
                         36
                                                   2.731 1.00
                                                                0.00
ATOM
        308
             CA
                 LEU
                         36
                                   4.006 -39.229
                                                   2.748 1.00
                                                                0.00
ATOM
        309
             CB
                 LEU
                         36
                                   3.027 -40.216
                                                   2.095
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        310
              CG
                 LEU
                         36
                                   1.763 -40.448
                                                   2.941
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
              CD1 LEU
                                   0.683 - 41.111
                                                   2.079
                                                          1.00
                                                                 0.00
        311
                         36
ATOM
        312
              CD2 LEU
                                   2.044 -41.339
                                                   4.159
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         36
ATOM
        313
             C
                  LEU
                         36
                                   5.374 -39.247
                                                   2.064
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        314
             0
                  LEU
                         36
                                   6.340 - 39.759
                                                   2.630
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                   5.459 -38.689
              N
                  HIS
                                                   0.856
ATOM
        315
                         37
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 HIS
ATOM
        316
              CA
                         37
                                   6.682 -38.635
                                                   0.073
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CB
                 HIS
ATOM
        317
                         37
                                   6.377 - 38.089
                                                  -1.327
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                   5.482 -38.978
ATOM
        318
              CG HIS
                         37
                                                  -2.153
                                                          1.00
                                                                 0.00
             ND1 HIS
                                   5.794 -40.299
ATOM
        319
                                                  -2.432
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         37
ATOM
              CE1 HIS
                                   4.797 -40.797
                                                  -3.184
                                                          1.00
                                                                 0.00
         320
                         37
ATOM
         321
              NE2 HIS
                                   3.837 -39.903
                                                  -3.429
                                                          1.00
                         37
                                                                 0.00
              CD2 HIS
ATOM
         322
                         37
                                   4.277 -38.756
                                                  -2.775
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         323
              С.
                  HIS
                         37
                                   7.774 -37.799
                                                   0.744
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                  HIS
                                   8.882 -38.295
         324
              0
                         37
                                                   0.935
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         325
              N
                  TYR
                         38
                                   7.475 -36.537
                                                   1.075
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         326
              CA
                  TYR
                         38
                                   8.428 -35.603
                                                   1.668
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         327
              CB
                  TYR
                         38
                                   8.549 -34.352
                                                   0.793
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  TYR
ATOM
         328
              CG
                         38
                                   8.844 -34.528
                                                  -0.691
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         329
              CD1 TYR
                         38
                                   8.316 -33.599
                                                  -1.609
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CE1 TYR
                                   8.583 -33.730
                                                  -2.983
ATOM
         330
                         38
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         331
              CZ TYR
                          38
                                   9.374 -34.791 -3.447
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OH TYR
                                   9.623 -34.910
                                                  -4.785
ATOM
         332
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          38
ATOM
         333
              CE2 TYR
                          38
                                   9.902 -35.722
                                                  -2.537
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CD2 TYR
ATOM
         334
                          38
                                   9.641 -35.591
                                                  -1.162
                                                          1.00
                                                                 0.00
              C
                  TYR
                                   8.025 -35.184
ATOM
         335
                          38
                                                   3.083
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         336
              0
                  TYR
                                   6.849 -34.963
                          38
                                                   3.367
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         337
              N
                  LYS
                          39
                                   9.022 -35.065
                                                    3.966
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         338 CA LYS
                          39
                                   8.869 -34.663
                                                    5.360 1.00 0.00
```

39 ATOM 339 CBLYS 39 9.948 -35.356 6.211 1.00 0.00 ATOM 340 CG LYS 39 9.501 -36.646 6.921 1.00 0.00 ATOM 341 CD LYS 39 8.984 -37.785 6.023 1.00 0.00 ATOM 342 CE LYS 39 7.477 -37.669 5.764 1.00 0.00 ATOM 343 NZ LYS 39 6.894 -38.869 5.141 1.00 0.00 ATOM C LYS 39 8.935 -33.139 5.499 1.00 0.00 344 ATOM 345 0 LYS 39 9.408 -32.433 4.610 1.00 0.00 ATOM 346 N PHE 40 8.445 -32.662 6.647 1.00 0.00 ATOM 347 CAPHE 40 8.383 -31.273 7.073 1.00 0.00 ATOM CB PHE 7.002 -30.679 6.751 1.00 0.00 348 40 ATOM 349 CG PHE 40 6.636 -30.560 5.282 1.00 0.00 ATOM CD1 PHE 6.189 -31.683 1.00 0.00 350 40 4.561 CE1 PHE 5.845 -31.562 3.203 1.00 0.00 ATOM 351 40 352 ATOM CZ PHE 5.941 -30.315 2.560 1.00 0.00 40 ATOM 353 CE2 PHE 40 6.387 - 29.1943.280 1.00 0.00 ATOM 354 CD2 PHE 40 6.734 - 29.3134.635 1.00 0.00 ATOM 355 C PHE 40 8.609 -31.270 8.589 1.00 0.00 0 PHE 8.675 -32.340 ATOM 356 40 9.194 1.00 0.00 ATOM-357 N ASN 41 8.717 -30.087 9.208 1.00 0.00 ATOM CA ASN 8.928 -29.963 1.00 358 41 10.648 0.00 ATOM 359 CB ASN 41 9.022 - 28.47911.040 1.00 0.00 CG ATOM 360 ASN 9.215 -28.299 12.547 1.00 0.00 41 ATOM 361 OD1 ASN 41 9.830 -29.133 13.204 1.00 0.00 ATOM ND2 ASN 8.687 -27.215 362 13.112 1.00 0.00 41 ATOM 363 C ASN 7.822 -30.683 11.429 1.00 0.00 41 ATOM 0 ASN 8.078 -31.683 12.095 1.00 364 41 0.00 ASN ATOM: 365 N 42 6.591 -30.170 11.338 1.00 0.00 ATOM CAASN 5.415 -30.723 11.999 366 42 1.00 0.00 ATOM 367 CBASN 42 5.470 -30.457 13.513 1.00 0.00 ATOM 368 CG ASN 42 4.250 -31.016 14.244 1.00 0.00 OD1 ASN ATOM 369 42 3.532 -31.865 13.722 1.00 0.00 ND2 ASN ATOM 370 42 4.011 -30.547 15.469 1.00 0.00 ATOM 371 C ASN 42 4.192 -30.078 11.349 1.00 0.00 **ATOM** 372 0 ASN 42 3.559 -29.200 11.934 1.00 0.00 ARG ATOM 373 N 43 3.891 -30.497 10.115 1.00 0.00 CA ARG 2.792 -29.975 ATOM 374 43 9.316 1.00 0.00 ARG 375 CB3.334 -29.527 0.00 ATOM 43 7.953 1.00 376 CG ARG 3.858 -28.086 7.910 1.00 0.00 ATOM 43 4.995 -27.808 **ATOM** CDARG 1.00 0.00 377 43 8.892 ATOM 378 NE ARG 43 5.539 - 26.4568.717 1.00 0.00 5.060 -25.350 ATOM 379 CZ ARG 9.307 1.00 0.00 43 ATOM 380 NH1 ARG 43 3.882 -25.375 9.946 1.00 0.00 ATOM NH2 ARG 5.780 -24.227 0.00 381 43 9.241 1.00 ATOM 382 C ARG 43 1.696 -31.025 9.122 1.00 0.00 0 ARG 1.902 -32.211 ATOM 383 43 9.370 1.00 0.00 ATOM 384 N THR 0.532 - 30.5538.662 1.00 0.00 44 ATOM 385 CA THR -0.662 -31.332 8.381 1.00 0.00 ATOM CB THR -1.718 -31.0431.00 0.00 386 44 9.462 ATOM 387 CG2 THR 44 -1.183 -31.282 10.879 1.00 0.00 ATOM OG1 THR -2.168 -29.705 388 9.338 1.00 0.00 44

```
41
                                                                    42
        389 C
ATOM
                 THR
                         44
                                 -1.223 -30.908
                                                   7.022 1.00 0.00
ATOM
        390
             0
                  THR
                         44
                                  -0.749 - 29.942
                                                   6.419
                                                          1.00 0.00
                  SER
ATOM
        391 N
                         45
                                  -2.265 -31.613
                                                   6.565 1.00 0.00
ATOM
        392 CA
                 SER
                         45
                                  -2.959 -31.297
                                                   5.325
                                                          1.00
                                                                 0.00
        393 CB
                 SER
ATOM
                         45
                                  -4.116 -32.283
                                                   5.131 1.00
                                                                 0.00
                 SER
ATOM
        394
             0G
                         45
                                  -4.879 -31.947
                                                   3.993
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        395
             С
                  SER
                         45
                                  -3.465 -29.851
                                                   5.402 1.00
                                                                 0.00
        396
            0
                  SER
ATOM
                         45
                                  -3.323 -29.091
                                                   4.445 1.00
                                                                 0.00
        397
             N
                  VAL
ATOM
                         46
                                  -4.033 - 29.478
                                                   6.560
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CA
                 VAL
ATOM
        398
                         46
                                  -4.538 -28.139
                                                   6.825
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             CB
                 VAL
        399
                                  -5.095 -28.027
                                                   8.260 1.00
                                                                 0.00
                         46
                                                          1.00
ATOM
        400
             CG1 VAL
                         46
                                  -5.607 -26.608
                                                   8.549
                                                                 0.00
ATOM
             CG2 VAL
        401
                         46
                                  -6.252 -29.004
                                                   8.497
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        402
             C
                  VAL
                         46
                                  -3.415 - 27.131
                                                   6.584
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        403
             0
                  VAL
                         46
                                  -3.587 - 26.229
                                                   5.769
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        404 N
                  MET
                         47
                                  -2.279 -27.293
                                                   7.281
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        405
             CA
                  MET
                         47
                                  -1.141 -26.390
                                                   7.135
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        406
             CB
                  MET
                         47
                                  0.061 -26.851
                                                   7.971
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        407
             CG
                  MET
                                  -0.147 - 26.908
                                                   9.490
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         47
ATOM
        408
             SD
                  MET
                         47
                                  -0.410 -25.331
                                                   10.341
                                                           1.00
                                                                 0.00
             CE
                  MET
ATOM
        409
                         47
                                  -2.214 -25.235
                                                   10.308
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        410
             С
                  MET
                         47
                                  -0.724 - 26.245
                                                   5.671
                                                           1.00
                                                                 0.00
             0
                  MET
ATOM
        411
                         47
                                  -0.735 - 25.139
                                                   5.141
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        412
             N
                  LEU
                         48
                                  -0.346 - 27.349
                                                    5.017
                                                           1.00
                                                                 0.00
             CA
                  LEU
ATOM
        413
                         48
                                   0.104 - 27.324
                                                    3.629
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        414
             CB
                 LEU
                         48
                                   0.360 - 28.744
                                                    3.106
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             CG
                 LEU
                                   1.812 -29.183
                                                   3.322
                                                           1.00
                                                                 0.00
        415
                         48
ATOM
        416
             CD1 LEU
                         48
                                   2.141 -29.377
                                                    4.799
                                                           1.00
                                                                 0.00
             CD2 LEU
ATOM
                                   2.068 - 30.503
                                                    2.602
                                                          1.00
                                                                 0.00
        417
                         48
ATOM
        418
             C
                  LEU
                          48
                                  -0.884 - 26.604
                                                    2.717
                                                           1.00
                                                                 0.00
             0
                  LEU
                                                           1.00
ATOM
        419
                                  -0.494 - 25.703
                                                    1.974
                                                                 0.00
                         48
                  LYS
ATOM
         420
             N
                         49
                                  -2.157 -27.006
                                                    2.765
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 LYS
ATOM
         421
             CA
                          49
                                  -3.158 -26.396
                                                    1.917 1.00
                                                                 0.00
ATOM
             CB
                 LYS
                                  -4.501 -27.112
                                                          1.00
                                                                 0.00
         422
                          49
                                                    2.027
                                                                 0.00
ATOM
         423
              CG
                 LYS
                                  -5.366 -26.681
                                                    0.832
                                                          1.00
                          49
ATOM
              CD
         424
                  LYS
                          49
                                  -6.850 - 26.715
                                                    1.155
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         425
              CE
                  LYS
                                  -7.296 -25.503
                                                    1.985
                                                           1.00
                          49
                                                                 0.00
ATOM
         426
              NZ
                  LYS
                          49
                                  -7.394 -24.281
                                                    1.164
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         427
              С
                  LYS
                          49
                                  -3.319 -24.907
                                                    2.207
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         428
              0
                  LYS
                          49
                                  -3.290 -24.120
                                                    1.266
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         429
              N
                  ASP
                          50
                                  -3.505 -24.497
                                                    3.468
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CA
                  ASP
                                  -3.682 -23.082
ATOM
         430
                          50
                                                    3.776
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CB
                  ASP
                          50
                                  -4.264 -22.835
                                                    5.179
                                                           1.00
                                                                 0.00
         431
              CG
                  ASP
                                  -3.339 -23.127
ATOM
         432
                                                    6.355
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          50
ATOM
         433
              OD1 ASP
                          50
                                  -3.853 -23.704
                                                    7.341
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OD2 ASP
ATOM
                                  -2.169 -22.700
         434
                          50
                                                    6.289
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C
                  ASP
ATOM
         435
                          50
                                  -2.445 -22.260
                                                    3.386
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              0
                  ASP
                                  -2.582 -21.112
         436
                          50
                                                    2.961
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         437
              N
                  ARG
                          51
                                  -1.246 -22.851
                                                    3.470
                                                           1.00
                                                                 0.00
             CA ARG
                                  -0.014 -22.194
ATOM
         438
                          51
                                                    3.056 1.00 0.00
```

```
43
                                                                    44
ATOM
        439
             CB
                 ARG
                         51
                                  1.203 -23.088
                                                    3.354
                                                           1.00 0.00
ATOM
             CG
                  ARG
                                  2.432 -22.308
                                                           1.00
                                                                 0.00
        440
                         51
                                                    3.819
                                                                 0.00
ATOM
        441
             CD
                  ARG
                         51
                                  3.021 -21.279
                                                    2.854
                                                          1.00
ATOM
        442
             NE
                  ARG
                                   4.022 -20.472
                                                          1.00
                         51
                                                    3.566
                                                                0.00
ATOM
        443 -
             CZ
                  ARG
                         51
                                   4.790 -19.506
                                                    3.037
                                                          1.00 0.00
ATOM
             NH1
                 ARG
                                   5.398 -18.626
                                                    3.845
                                                           1.00
                                                                 0.00
        444
                         51
ATOM
        445
             NH2 ARG
                         51
                                   4.956 -19.417
                                                    1.714
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C
ATOM
        446
                  ARG
                         51
                                  -0.105 - 21.918
                                                    1.556
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        447
             0
                  ARG
                         51
                                   0.050 - 20.778
                                                    1.112
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  TRP
                                  -0.365 -22.974
ATOM
        448
              N
                         52
                                                    0.770
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        449
              CA
                  TRP
                         52
                                  -0.472 -22.865
                                                   -0.665
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CB
                  TRP
                                  -0.570 -24.262
                                                   -1.276
ATOM
         450
                         52
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         451
              CG
                 TRP
                          52
                                  -0.243 -24.260
                                                   -2.730
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CD1 TRP
                                  -1.145 -24.277
                                                   -3.728
                                                                 0.00
         452
                          52
                                                           1.00
              NE1 TRP
ATOM
         453
                          52
                                  -0.497 -24.255
                                                  -4.946
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CE2 TRP
                                   0.873 -24.218
                                                  -4.782
ATOM
         454
                          52
                                                           1.00
                                                                  0.00
              CZ2 TRP
                          52
                                   1.951 -24.178
                                                  -5.680
                                                                  0.00
ATOM
         455
                                                           1.00
              CH2 TRP
                                   3.261 -24.146
                                                   -5.179
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
                          52
         456
              CZ3 TRP
                                   3.483 -24.157
                                                  -3.791
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         457
                          52
              CE3 TRP
                                                  -2.897
ATOM
                                   2.397 -24.193
                                                           1.00
                                                                  0.00
         458
                          52
              CD2 TRP
ATOM
         459
                          52
                                   1.066 -24.225
                                                  -3.369
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C
                  TRP
                                  -1.633 -21.952
ATOM
         460
                          52
                                                   -1.071
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              0
                  TRP
                          52
                                  -1.547 -21.277
                                                   -2.092
                                                           1.00
                                                                  0.00
         461
ATOM
         462
              N
                  ARG
                          53
                                  -2.706 -21.919
                                                   -0.270
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  ARG
ATOM
         463
              CA
                          53
                                  -3.884 -21.093
                                                   -0.488
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                  -4.931 -21.370
ATOM
         464
              CB
                  ARG
                          53
                                                    0.601
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         465
              CG
                  ARG
                          53
                                  -6.288 -20.700
                                                    0.342
                                                          1.00
                                                                  0.00
ATOM
         466
              CD
                  ARG
                                  -6.862 -20.064
                                                    1.616
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          53
ATOM
         467
              NE
                  ARG
                          53
                                  -6.900 -20.994
                                                    2.759
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         468
              CZ
                  ARG
                          53
                                  -7.525 -20.745
                                                    3.924
                                                           1.00
                                                                  0.00
              NH1 ARG
ATOM
         469
                          53
                                  -8.165 - 19.585
                                                    4.107
                                                           1.00
                                                                  0.00
              NH2 ARG
                                  -7.514 -21.659
ATOM
         470
                          53
                                                    4.902
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  ARG
ATOM
         471
              C
                                  -3.459 -19.627
                                                   -0.478
                                                           1.00
                          53
                                                                  0.00
ATOM
         472
              0
                  ARG
                          53
                                  -3.663 - 18.930
                                                   -1.471
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         473
              N
                  THR
                          54
                                  -2.868 - 19.165
                                                    0.634
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              CA
                  THR
                                                           1.00
         474
                          54
                                  -2.406 -17.789
                                                    0.767
                                                                  0.00
ATOM
              CB
                  THR.
                          54
                                  -1.714 -17.583
                                                    2.122
                                                           1.00
                                                                  0.00
         475
ATOM
         476
              CG2 THR
                          54
                                  -1.401 -16.101
                                                    2.342 1.00
                                                                  0.00
              OG1 THR
ATOM
         477
                          54
                                  -2.541 -18.029
                                                    3.175
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         478
              C
                  THR
                                  -1.444 - 17.451
                                                   -0.370
                          54
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         479
              0
                  THR
                                  -1.556 -16.396
                                                   -0.994
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          54
ATOM
         480
              N
                  MET
                          55
                                  -0.498 -18.359
                                                   -0.633
                                                            1.00
                                                                  0.00
              CA
ATOM
         481
                  MET
                          55
                                   0.491 - 18.189
                                                   -1.678
                                                           1.00
                                                                  0.00
              CB
                  MET
                                   1.443 -19.394
ATOM
         482
                          55
                                                   -1.661
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         483
              CG
                  MET
                          55
                                   2.633 - 19.275
                                                   -2.623
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  MET
              SD
                                   2.275 - 19.358
                                                   -4.399
ATOM
         484
                          55
                                                            1.00
                                                                  0.00
              CE
                  MET
ATOM
         485
                          55
                                   1.539 -21.005
                                                   -4.485
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         486
              C
                  MET
                                  -0.188 -17.924
                                                   -3.027
                                                            1.00
                                                                  0.00
                          55
ATOM
                  MET
         487
              0
                          55
                                   0.021 - 16.858
                                                   -3.604
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         488
              N
                  LYS
                                  -0.994 -18.866 -3.539
                                                           1.00
                                                                 0.00
```

```
45
                                                                 46
ATOM
        489 CA LYS
                        56
                                -1.655 -18.699 -4.827 1.00 0.00
                                -2.308 -19.997 -5.336
ATOM
        490
            CB
                 LYS
                        56
                                                        1.00
                                                               0.00
        491 CG
                 LYS
                        56
                                -3.604 -20.422 -4.622 1.00
ATOM
                                                               0.00
        492 CD
                 LYS
                                -4.502 -21.270 -5.532 1.00
ATOM
                        56
                                                               0.00
        493
            CE
                 LYS
                        56
                                -3.850 -22.593
                                                -5.944
ATOM
                                                        1.00
                                                               0.00
        494 NZ
                 LYS
                                -4.752 -23.399
ATOM
                        56
                                                -6.787
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        495
            C
                 LYS
                        56
                                -2.627 -17.517
                                                -4.856
                                                        1.00
                                                               0.00
        496
            0
                 LYS
                                -2.750 -16.864 -5.886
ATOM
                        56
                                                        1.00
                                                               0.00
            N
                                                -3.747
ATOM
        497
                 LYS
                        57
                                -3.321 -17.234
                                                        1.00
                                                               0.00
        498 CA
                 LYS
                                -4.286 -16.143 -3.671
ATOM
                        57
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        499
            CB
                 LYS
                                -4.858 -16.072 -2.245
                        57
                                                         1.00
                                                               0.00
                                                        1.00
ATOM
        500 CG
                 LYS
                        57
                                -5.850 -14.925 -1.996
                                                               0.00
ATOM
        501
             CD
                 LYS
                        57
                                -7.105 -15.033 -2.876
                                                        1.00
                                                               0.00
                                                               0.00
ATOM
        502
            CE
                 LYS
                        57
                                -8.117 -13.917 -2.580
                                                        1.00
ATOM
        503
             NZ
                 LYS
                        57
                                -8.705 -14.026
                                                -1.231
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        504 C
                 LYS
                        57
                                -3.675 -14.809
                                                -4.106
                                                        1.00
                                                               0.00
                                -4.361 -14.000 -4.729
             0
                 LYS
ATOM
        505
                        57
                                                        1.00
                                                               0.00
             N
                 LEU
ATOM
        506
                        58
                                -2.401 -14.580
                                                -3.768
                                                        1.00
                                                               0.00
             CA
                 LEU
                                -1.691 -13.347 -4.079
ATOM
        507
                        58
                                                         1.00
                                                               0.00
            CB
                 LEU
                                 -0.928 -12.899
                                                -2.823
ATOM
        508
                        58
                                                         1.00
                                                               0.00
                 LEU
        509
             CG
                                 -1.816 -12.683
                                                -1.584
                                                         1.00
ATOM
                        58
                                                               0.00
ATOM
        510
             CD1 LEU
                        58
                                 -0.918 -12.390 -0.378
                                                         1.00
                                                               0.00
             CD2 LEU
                                 -2.797 -11.522
                                                -1.779
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        511
                        58
             C
ATOM
        512
                 LEU
                        58
                                 -0.712 -13.482 -5.250
                                                         1.00
                                                               0.00
        513
             0
                 LEU
                                 -0.554 - 12.536
                                                -6.019
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
                        58
             N
                 LYS
                                                -5.363
                                                               0.00
ATOM
        514
                        59
                                 -0.019 -14.622
                                                        1.00
                                  1.027 -14.853
ATOM
             CA
                 LYS
                                                 -6.358
                                                         1.00
                                                               0.00
        515
                        59
                 LYS
                                                 -5.653
ATOM
             CB
                                  2.238 -15.485
                                                        1.00
                                                               0.00
        516
                        59
             CG
                 LYS
                                  2.613 -14.705 -4.382
                                                        1.00
ATOM
        517
                        59
                                                               0.00
ATOM
        518
             CD
                 LYS
                        59
                                  3.844 -15.297 -3.685
                                                        1.00
                                                              0.00
ATOM
             CE
                 LYS
                                  3.996 -14.732
                                                -2.265
                                                         1.00
                                                               0.00
        519
                        59
             NZ
                 LYS
                                  2.925 -15.203
                                                 -1.363
ATOM
        520
                        59
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        521
             C
                 LYS
                        59
                                  0.589 - 15.672 - 7.578
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        522
             0
                 LYS
                                  1.222 -15.572
                                                 -8.627
                                                         1.00
                                                               0.00
                        59
        523
             N
                 LEU
                                 -0.476 -16.473
                                                 -7.457
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
                        60
ATOM
             CA
                 LEU
                                 -1.042 -17.303
                                                 -8.520
                                                         1.00
                                                               0.00
        524
                        60
ATOM
        525
             CB
                 LEU
                         60
                                 -1.721 - 16.426
                                                 -9.587
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        526
             CG
                 LEU
                         60
                                 -2.915 -15.622
                                                 -9.044
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        527
             CD1 LEU
                         60
                                 -3.253 -14.487 -10.018
                                                         1.00
                                                               0.00
             CD2 LEU
                                 -4.159 -16.503
ATOM
        528
                                                 -8.866
                                                         1.00
                                                               0.00
                         60
ATOM
        529
             C
                 LEU
                         60
                                 -0.041 -18.288
                                                -9.139
                                                         1.00
                                                               0.00
        530
             0
                 LEU
                                  0.422 -18.082 -10.259
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
                         60
             N
                 ILE
ATOM
        531
                         61
                                  0.257 - 19.377
                                                -8.418
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        532
             CA ILE
                                  1.134 -20.456
                                                 -8.867
                                                         1.00
                                                               0.00
                         61
ATOM
        533
             CB ILE
                                  2.535 -20.371
                                                 -8.221
                                                         1.00
                                                               0.00
                         61
ATOM
        534
             CG2 ILE
                                  3.375 -21.631
                                                 -8.475
                                                         1.00
                                                               0.00
                         61
             CG1 ILE
                                  3.322 -19.147
                                                -8.722
ATOM
        535
                         61
                                                         1.00
                                                               0.00
             CD1 ILE
                                  3.323 -18.053
                                                 -7.659
                                                                0.00
ATOM
        536
                         61
                                                         1.00
ATOM
        537
             С
                  ILE
                                  0.439 - 21.787
                                                 -8.570
                                                         1.00
                                                               0.00
                         61
ATOM
        538 0
                  ILE
                                 -0.253 -21.926 -7.561 1.00 0.00
                         61
```

```
47
                                                                    48
ATOM
        539
             N
                 SER
                         62
                                  0.636 -22.757 -9.465 1.00 0.00
ATOM
        540
             CA
                 SER
                         62
                                  0.098 -24.107 -9.416
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 SER
ATOM
             CB
                         62
                                 -1.403 -24.077 -9.739
                                                          1.00
                                                                 0.00
        541
ATOM
        542
             0G
                 SER
                         62
                                 -1.619 -23.531 -11.025
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C
                  SER
                         62
ATOM
        543
                                  0.910 -24.948 -10.409
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        544
             0
                  SER
                         62
                                  1.967 -24.508 -10.867
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N
                  SER
        545
                         63
                                  0.434 -26.148 -10.754
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                 SER
        546
             CA
                         63
                                  1.103 -27.027 -11.701
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        547
             CB
                  SER
                         63
                                   2.261 -27.762 -11.010
                                                                 0.00
ATOM
                                                          1.00
             0G
                 SER
ATOM
        548
                         63
                                   3.008 -28.492 -11.959
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C
ATOM
        549
                  SER
                         63
                                   0.067 - 27.973 - 12.305
                                                          1.00
                                                                 0.00
             0
                  SER
ATOM
        550
                         63
                                  -0.246 -27.875 -13.489
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N
                  ASP
ATOM
        551
                         64
                                  -0.464 -28.873 -11.472
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             CA
                 ASP
        552
                                  -1.481 -29.858 -11.806
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         64
             CB
                  ASP
ATOM
        553
                                  -0.858 -31.027 -12.592
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         64
ATOM
             CG
                 ASP
        554
                         64
                                  -1.854 -31.714 -13.528
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        555
             OD1 ASP
                                  -3.019 -31.903 -13.112
                         64
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        556
             OD2 ASP
                                  -1.435 -32.021 -14.666
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         64
ATOM
             C
                  ASP
         557
                         64
                                  -2.096 -30.303 -10.475
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         558
             0
                  ASP
                         64
                                  -1.749 -29.750 -9.430
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             N
                  SER
                                  -3.000 -31.283 -10.491
         559
                         65
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         560
             CA
                  SER
                         65
                                  -3.661 -31.806
                                                  -9.301
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             CB
                  SER
                                  -4.689 -30.798
                                                  -8.762
         561
                         65
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         562
             0G
                  SER
                         65
                                  -4.934 -31.026
                                                  -7.387
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         563
             C
                  SER
                         65
                                  -4.293 -33.178 -9.551
                                                                 0.00
                                                           1.00
ATOM
         564
              0
                  SER
                         65
                                  -4.403 -33.964 -8.611
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         565
              N
                  GLU
                         66
                                  -4.714 -33.479 -10.789
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         566
              CA
                  GLU
                         66
                                  -5.327 -34.755 -11.137
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CB
                  GLU
                                  -6.288 -34.564 -12.320
         567
                         66
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         568
              CG
                  GLU
                          66
                                  -7.436 -33.607 -11.959
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CD
                  GLU
ATOM
         569
                                  -8.485 -33.547 -13.066
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         66
              OE1 GLU
ATOM
         570
                         66
                                  -9.160 -34.580 -13.265
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              OE2 GLU
         571
                          66
                                  -8.601 -32.468 -13.688
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         572
             C
                  GLU
                          66
                                  -4.239 -35.799 -11.415
                                                                 0.00
                                                          1.00
                  GLU
ATOM
         573
              0
                          66
                                  -4.196 -36.399 -12.490
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         574
              N
                  ASP
                          67
                                  -3.367 -36.006 -10.425
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         575
              CA
                  ASP
                                  -2.250 -36.933 -10.438
                                                           1.00
                          67
                                                                 0.00
                  ASP
ATOM
         576
              CB
                          67
                                  -1.059 -36.328 -11.199
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         577
              CG ASP
                          67
                                  -0.426 -35.132 -10.487
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OD1 ASP
ATOM
         578
                          67
                                  -1.062 -34.053 -10.490
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         579
              OD2 ASP
                          67
                                   0.702 - 35.311
                                                  -9.976
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C
                  ASP
ATOM
         580
                          67
                                  -1.890 -37.238
                                                  -8.984
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         581
             OT1 ASP
                          67
                                  -1.832 -38.442
                                                   -8.643
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         582
              OT2 ASP
                                  -2.086 -36.308
                                                   -8.169
                          67
                                                           1.00
                                                                 0.00
              05' GUA
                                  -6.552 -39.568
ATOM
         583
                          68
                                                  11.338
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C5' GUA
                                  -6.299 - 40.427
                                                   10.246
         584
                          68
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C4'
                  GUA
                                  -6.654 -39.743
         585
                          68
                                                    8.921
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         586
              04'
                  GUA
                          68
                                  -8.009 -39.338
                                                    8.903
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C1'
                  GUA
         587
                          68
                                  -8.164 -38.378
                                                    7.881
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         588
              N9
                  GUA
                          68
                                  -9.383 -37.574
                                                    8.109 1.00 0.00
```

	49				(/				50
ATOM	589	C8	GUA	68	-9.770	-36.951	9.265	1.00	0.00
ATOM	590	N7	GUA	68	-10.925		9.192	1.00	0.00
ATOM	591	C5	GUA	68	-11.331		7.880	1.00	0.00
ATOM	592	C6	GUA	68	-12.512		7.198	1.00	0.00
ATOM	593	06	GUA	68		-35.549	7.656	1.00	0.00
ATOM	594	N1	GUA	68		-36.503	5.852	1.00	0.00
ATOM	595	C2	GUA	68		-37.213	5.236	1.00	0.00
ATOM	596	N2	GUA	68		-37.450	3.928	1.00	0.00
ATOM	597	N3	GUA	68		-37.645	5.884	1.00	0.00
ATOM	598	C4	GUA	68		-37.292	7.198	1.00	0.00
ATOM	599	C3'	GUA	68		-38.467	8.651	1.00	0.00
ATOM	600	C2'	GUA	68		-37.541	8.053	1.00	0.00
ATOM	601	03'	GUA	68		-38.784	7.758	1.00	0.00
ATOM	602	P	THY	69		-37.683	7.158		0.00
ATOM	603		THY	69		-38.405	6.481	1.00	0.00
ATOM	604		THY	69		-36.697	8.217	1.00	0.00
ATOM	605	05'	THY	69		-36.942	6.022	1.00	0.00
ATOM	606	C5'	THY			-30.942			
ATOM	607	C4'	THY	69 69		-36.844	5.035 4.360	1.00	0.00
ATOM	608	04'	THY	69		-36.402			0.00
ATOM	609	C1'	THY	69		-35.311	5.172 4.531	1.00	0.00
ATOM	610	N1	THY	69		-34.596	5.490	1.00	0.00
ATOM	611	C6	THY	69		-34.422	6.792	1.00	0.00
ATOM	612	C5	THY	69		-33.785	7.694	1.00	0.00
ATOM	613	C7	THY	69		-33.623	9.094	1.00	0.00
ATOM	614	C4	THY	69		-33.283	7.333	1.00	0.00
ATOM	615	04	THY	69		-32.700	8.081	1.00	0.00
ATOM	616	N3	THY	69		-33.514	6.011	1.00	0.00
ATOM	617	C2	THY	69		-34.139	5.059	1.00	0.00
ATOM	618	02	THY	69		-34.139	3.907	1.00	0.00
ATOM	619	C3'	THY	69		-35.578	3.682		0.00
ATOM	620	C2'	THY	69		-34.503		1.00	0.00
ATOM	621	03'	THY	69		-35.723	4.155 2.273	1.00	0.00
ATOM	622	03 P	THY	70		-34.601	1.344	1.00	0.00
ATOM	623		THY	70 70		-35.250	0.124	1.00	0.00
ATOM	624		THY	70 70		-33.831	2.196	1.00	0.00
ATOM	625	05'	THY	70 70		-33.625	0.950	1.00	0.00
ATOM	626	C5'	THY	70 70		-34.034	0.330	1.00	0.00
ATOM	627	C4'	THY	70		-33.015	0.103	1.00	0.00
ATOM	628	04'	THY	70		-32.911	1.565	1.00	0.00
ATOM	629	C1'	THY	70		-31.711	1.683	1.00	0.00
ATOM	630	N1	THY	70		-31.296	3.102	1.00	0.00
ATOM	631	C6	THY			-31.353	3.102	1.00	0.00
ATOM	632	C5	THY			-30.955	5.247	1.00	0.00
ATOM	633	C7	THY			-31.065	6.085	1.00	0.00
ATOM	634	C4	THY			-30.452	5.780	1.00	0.00
ATOM	635	04	THY			-30.035	6.922	1.00	0.00
ATOM	636	N3	THY			-30.469	4.871	1.00	0.00
ATOM	637	C2	THY			-30.803	3.528	1.00	0.00
ATOM	638	02	THY			-30.623	2.773	1.00	0.00
VION	030	UZ	1111	10	12.023	50.023	2.113	1.00	0.00

```
51
                                                                    52
        639
             C3'
                 THY
                         70
                                 -8.117 -31.585 -0.149
                                                          1.00 0.00
ATOM
             C2'
                 THY
                                 -8.814 -30.722
                                                   0.910
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        640
                         70
ATOM
        641
             03'
                 THY
                         70
                                  -8.507 -31.272
                                                  -1.473
                                                           1.00
                                                                 0.00
             P
                                  -8.086 -29.877
                                                  -2.165
ATOM
        642
                  ADE
                         71
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                 -6.775 -29.455
ATOM
        643
             OP1 ADE
                         71
                                                  -1.613
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP2 ADE
                                  -8.265 -30.000
ATOM
        644
                                                  -3.626
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         71
ATOM
        645
             05'
                 ADE
                         71
                                  -9.188 -28.855
                                                   -1.601
                                                           1.00
                                                                 0.00
        646
             C5'
                 ADE
                                 -10.532 -28.840
                                                   -2.049
                                                           1.00
ATOM
                         71
                                                                 0.00
ATOM
        647
             C4'
                 ADE
                         71
                                 -11.299 -27.716
                                                   -1.331
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        648
             04'
                  ADE
                                 -11.625 -28.090
                                                    0.015
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         71
ATOM
        649
             C1'
                  ADE
                         71
                                 -11.396 -26.981
                                                    0.864
                                                           1.00
                                                                  0.00
              N9
                  ADE
ATOM
        650
                         71
                                 -11.155 -27.295
                                                    2.298
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        651
              68
                  ADE
                         71
                                 -10.020 -27.840
                                                    2.848
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              N7
                  ADE
                                  -9.936 -27.775
                                                           1.00
                                                                  0.00
        652
                         71
                                                    4.141
ATOM
        653
              C5
                  ADE
                         71
                                 -11.127 -27.168
                                                    4.494
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  ADE
ATOM
        654
              6
                         71
                                 -11.654 -26.806
                                                    5.743
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         655
              N6
                  ADE
                          71
                                 -10.988 -27.049
                                                    6.873
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
                                 -12.844 -26.183
              N1
                  ADE
                                                    5.788
                                                           1.00
                                                                  0.00
         656
                         71
ATOM
         657
              C2
                  ADE
                         71
                                 -13.472 -25.928
                                                    4.639
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  ADE
ATOM
              N3
                                 -13.076 -26.212
                                                    3.398
                                                           1.00
                                                                  0.00
         658
                         71
ATOM
         659
              Ç4
                  ADE
                          71
                                 -11.877 - 26.854
                                                    3.389
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C3'
                                 -10.419 -26.453
ATOM
         660
                  ADE
                                                   -1.228
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          71
ATOM
              C2'
         661
                  ADE
                          71
                                 -10.084 -26.530
                                                    0.251
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                 -11.112 -25.269
ATOM
         662
              03'
                  ADE
                          71
                                                   -1.549
                                                           1.00
                                                                  0.00
              P
                  GUA
                          72
                                 -10.357 -23.841
ATOM
         663
                                                   -1.636
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              OP1 GUA
                                 -10.403 -23.353
                                                   -3.031
         664
                          72
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              OP2 GUA
                          72
                                  -9.059 -23.917
                                                   -0.917
                                                           1.00
                                                                  0.00
         665
              05' GUA
                                 -11.344 -22.952
ATOM
         666
                          72
                                                   -0.746
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C5'
                  GUA
                                 -12.711 -22.815
ATOM
         667
                          72
                                                   -1.080
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              C4'
                  GUA
                                 -13.453 -22.191
                                                    0.100
                                                           1.00
                                                                  0.00
         668
                          72
ATOM
         669
              04'
                  GUA
                          72
                                 -13.161 -22.937
                                                    1.276
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         670
              C1'
                  GUA
                          72
                                 -12.649 - 22.089
                                                    2.283
                                                           1.00
                                                                  0.00
              N9
                  GUA
ATOM
         671
                          72
                                 -11.653 -22.801
                                                    3.119
                                                            1.00
                                                                  0.00
                                 -10.447 - 23.335
ATOM
         672
              С8
                  GUA
                          72
                                                    2.740
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         673
              N7
                  GUA
                                  -9.722 -23.791
                                                    3.723
                                                           1.00
                          72
                                                                  0.00
ATOM
         674
              C5
                  GUA
                          72
                                 -10.525 -23.583
                                                    4.842
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                 -10.283 -23.874
                  GUA
ATOM
         675
              C6
                          72
                                                    6.219
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                  -9.263 -24.339
ATOM
         676
              06
                  GUA
                          72
                                                    6.726
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
                  GUA
                                 -11.371 -23.568
         677
              N1
                          72
                                                    7.031
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         678
              C2
                  GUA
                          72
                                 -12.557 -23.031
                                                    6.571
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         679
              N2
                  GUA
                                 -13.504 -22.751
                                                    7.465
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          72
                                 -12.771 -22.717
ATOM
         680
              N3
                  GUA
                          72
                                                    5.286
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         681
              C4
                  GUA
                          72
                                 -11.725 -23.020
                                                    4.474
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         682
              C3'
                  GUA
                          72
                                 -13.013 -20.747
                                                    0.373
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C2'
                  GUA
ATOM
         683
                          72
                                 -11.999 -20.951
                                                    1.495
                                                           1.00
                                                                  0.00
              03'
ATOM
         684
                  GUA
                          72
                                 -14.159 -20.013
                                                    0.760
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         685
              P
                  GUA
                          73
                                 -14.106 -18.458
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                                    1.184
              OP1 GUA
ATOM
         686
                          73
                                 -15.271 -17.774
                                                    0.584
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         687
              OP2 GUA
                          73
                                 -12.741 -17.936
                                                    0.948
                                                           1.00
                                                                  0.00
              05' GUA
                                 -14.345 -18.583
ATOM
         688
                          73
                                                    2.772 1.00
                                                                 0.00
```

```
53
                                                                    54
ATOM
        689
             C5'
                 GUA
                         73
                                 -15.558 -19.111
                                                          1.00 0.00
                                                    3.280
                                 -15.586 -19.068
ATOM
        690
             C4'
                  GUA
                         73
                                                    4.810
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        691
             04'
                  GUA
                         73
                                 -14.520 -19.842
                                                    5.337
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        692
             C1'
                  GUA
                         73
                                 -13.825 -19.108
                                                    6.323
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        693
             N9
                  GUA
                         73
                                 -12.414 -19.556
                                                    6.349
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        694
             68
                  GUA
                         73
                                 -11.559 -19.694
                                                    5.287
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        695
             N7
                  GUA
                         73
                                 -10.401 -20.210
                                                    5.588
                                                           1.00
                                                                 0.00
        696
             C5
                  GUA
                         73
                                 -10.483 -20.424
ATOM
                                                    6.956
                                                           1.00
                                                                  0.00
             60
                  GUA
                                  -9.523 -20.984
ATOM
        697
                         73
                                                    7.848
                                                           1.00
                                                                 0.00
             06
                  GUA
                                  -8.405 -21.413
ATOM
        698
                         73
                                                    7.565
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        699
             N1
                  GUA
                                  -9.973 -21.002
                         73
                                                    9.163
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        700
             C2
                  GUA
                         73
                                 -11.214 -20.548
                                                    9.571
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  GUA
ATOM
        701
             N2
                         73
                                 -11.496 -20.579
                                                   10.874
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  GUA
ATOM
        702
             N3
                         73
                                 -12.128 -20.053
                                                    8.726
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C4
                  GUA
ATOM
        703
                         73
                                 -11.705 -20.012
                                                    7.436
                                                           1.00
                                                                  0.00
             C3'
                  GUA
ATOM
        704
                         73
                                 -15.410 -17.644
                                                    5.355
                                                           1.00
                                                                  0.00
             C2'
                  GUA
        705
                         73
ATOM
                                 -13.955 -17.673
                                                    5.819
                                                           1.00
                                                                  0.00
             03'
                  GUA
        706
                         73
                                 -16.335 -17.438
ATOM
                                                    6.411
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        707
              P
                  GUA
                                                           1.00
                         74
                                 -16.563 -15.991
                                                    7.092
                                                                  0.00
             OP1 GUA
ATOM
        708
                         74
                                 -16.269 -14.941
                                                    6.092
                                                           1.00
                                                                  0.00
        709
              OP2 GUA
ATOM
                         74
                                 -17.872 -16.004
                                                    7.782
                                                           1.00
                                                                  0.00
             05'
                  GUA
ATOM
        710
                         74
                                 -15.405 -15.961
                                                    8.207
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              C5'
                  GUA
        711
                         74
                                 -15.498 -16.750
                                                    9.376
                                                           1.00
                                                                  0.00
             C4'
                  GUA
ATOM
        712
                         74
                                 -14.173 -16.724
                                                   10.140
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        713
              04'
                  GUA
                         74
                                 -13.130 -17.271
                                                    9.360
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  GUA
        714
             C1'
                         74
                                 -11.913 -16.764
ATOM
                                                    9.857
                                                           1.00
                                                                  0.00
              N9
                  GUA
ATOM
                                 -10.823 -17.002
                                                           1.00
                                                                  0.00
        7.15
                         74
                                                    8.883
              С8
                  GUA
ATOM
        716
                         74
                                 -10.824 -16.755
                                                    7.534
                                                           1.00
                                                                  0.00
              N7
                  GUA
                                  -9.749 -17.148
                                                           1.00
ATOM
        717
                         74
                                                    6.911
                                                                  0.00
              C5
                  GUA
                         74
                                  -8.952 -17.663
ATOM
        718
                                                    7.926
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        719
              C6
                  GUA
                         74
                                  -7.649 -18.246
                                                    7.864
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        720
              06
                  GUA
                         74
                                  -6.976 - 18.549
                                                    6.880
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        721
              N1
                  GUA
                         74
                                  -7.139 -18.501
                                                    9.124
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        722
              C2
                  GUA
                         74
                                  -7.838 -18.354
                                                   10.296
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        723
              N2
                  GUA
                          74
                                  -7.103 -18.576
                                                   11.377
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        724
              N3
                  GUA
                          74
                                  -9.095 ~17.899
                                                   10.366
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        725
              C4
                  GUA
                          74
                                  -9.589 - 17.552
                                                    9.144
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C3'
                  GUA
ATOM
        726
                          74
                                 -13.698 -15.313
                                                   10.522
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         727
              C2'
                  GUA
                          74
                                 -12.265 -15.286
                                                    9.974
                                                           1.00
                                                                  0.00
              03'
                  GUA
ATOM
         728
                          74
                                 -13.769 -15.189
                                                   11.931
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         729
              P
                  THY
                          75
                                 -13.406 -13.827
                                                   12.721
                                                            1.00
                                                                  0.00
              OP1 THY
ATOM
         730
                          75
                                 -14.522 -13.500
                                                   13.635
                                                           1.00
                                                                  0.00
              OP2 THY
ATOM
         731
                          75
                                 -12.916 -12.816
                                                   11.757
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         732
              05' THY
                          75
                                 -12.155 -14.318
                                                   13.603
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C5'
ATOM
         733
                  THY
                                 -12.306 -15.346
                                                                  0.00
                          75
                                                   14.564
                                                           1.00
ATOM
         734
              C4'
                  THY
                                 -10.942 -15.749
                                                   15.125
                          75
                                                           1.00
                                                                  0.00
              04'
                  THY
ATOM
         735
                          75
                                 -10.083 -16.091
                                                   14.049
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C1'
                  THY
ATOM
         736
                          75
                                  -8.832 -15.459
                                                   14.209
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
              N1
                  THY
         737
                          75
                                  -8.203 -15.246
                                                   12.875
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         738
              С6
                  THY
                          75
                                  -8.878 -14.563 11.887 1.00 0.00
```

					(20)	[1][1][2]
	55		m. n.		0.050 44 400 40 040 4 00	56
ATOM	739	C5	THY	75 75	-8.358 -14.428 10.640 1.00	0.00
ATOM	740	C7	THY	75	-9.160 -13.626 9.633 1.00	0.00
ATOM	741	C4	THY	75 	-7.090 -15.028 10.284 1.00	0.00
ATOM	742	04	THY	75	-6.602 -15.057 9.159 1.00	
ATOM	743	N3	THY	75	-6.438 -15.629 11.344 1.00	0.00
ATOM	744	C2	THY	75	-6.942 -15.789 12.627 1.00	
ATOM	745	02	THY	75	-6.277 -16.382 13.473 1.00	
ATOM	746	C3'	THY ·	75	-10.252 -14.618 15.904 1.00	0.00
ATOM	747	C2'	THY	75	-9.200 -14.147 14.901 1.00	0.00
ATOM	748	03'	THY	75	-9.694 -15.157 17.090 1.00	0.00
ATOM	749	P	THY	76	-8.901 -14.258 18.173 1.00	0.00
ATOM	750	0P1	THY	76	-9.275 -14.724 19.526 1.00	0.00
ATOM	751	0P2	THY-	76	-9.046 -12.830 17.816 1.00	0.00
ATOM-	752	05'	THY	76	-7.378 -14.693 17.894 1.00	0.00
ATOM	753	C5'	THY	76	-6.949 -16.017 18.152 1.00	0.00
ATOM	754	C4'	THY	76	-5.504 -16.212 17.690 1.00	0.00
ATOM	755	04'	THY	76	-5.410 -15.864 16.322 1.00	0.00
ATOM	756	C1'	THY	76	-4.249 -15.098 16.098 1.00	0.00
ATOM	757	N1	THY	76	-4.444 -14.280 14.866 1.00	0.00
ATOM	758	C6	THY	76	-5.472 -13.365 14.789 1.00	0.00
ATOM	759	C5	THY	76	-5.770 -12.731 13.625 1.00	0.00
ATOM	760	C7	THY	76	-6.914 -11.733 13.648 1.00	0.00
ATOM	761	C4	THY	76	-5.040 -13.005 12.406 1.00	0.00
ATOM	762	04	THY	76	-5.271 -12.521 11.301 1.00	
ATOM	763	N3	THY	76	-4.022 -13.928 12.564 1.00	0.00
ATOM	764	C2	THY	76	-3.676 -14.577 13.739 1.00	
ATOM	765	02	THY	76	-2.727 -15.363 13.751 1.00	
ATOM	766	C3'	THY	76	-4.495 -15.327 18.441 1.00	
ATOM	767	C2'	THY	76	-4.128 -14.281 17.385 1.00	
ATOM	768	03'	THY:	76	-3.398 -16.135 18.834 1.00	
ATOM	769	P	ADE	77	-2.210 -15.589 19.781 1.00	
ATOM	770	0P1	ADE	77	-1.703 -16.737 20.568 1.00	
ATOM	771		ADE	77	-2.662 -14.361 20.470 1.00	
ATOM	772	05'	ADE	77	-1.088 -15.195 18.702 1.00	
ATOM	773	C5'	ADE	77	-0.336 -16.202 18.059 1.00	
ATOM	774	C4'	ADE	77	0.527 -15.615 16.946 1.00	
ATOM	775	04'	AĎE	77	-0.267 -14.973 15.972 1.00	
ATOM	776	C1'	ADE	77	0.528 -13.993 15.345 1.00	
ATOM	777	N9	ADE	77	-0.350 -13.072 14.591 1.00	
ATOM	778	C8	ADE	77	-1.478 -12.429 15.037 1.00	
ATOM	779	N7	ADE	77	-2.141 -11.801 14.107 1.00	
ATOM	780	C5	ADE	77	-1.382 -12.022 12.964 1.00	
ATOM	781	C6	ADE	77	-1.537 -11.619 11.625 1.00	
ATOM	782	N6	ADE	77	-2.584 -10.898 11.224 1.00	
ATOM	783	N1	ADE	77	-0.589 -11.958 10.729 1.00	
ATOM	784	C2	ADE	77	0.441 -12.695 11.143 1.00	
ATOM	785	N3	ADE	77	0.672 -13.187 12.359 1.00	
ATOM	786	C4	ADE	77	-0.278 -12.784 13.247 1.00	
ATOM	787	C3'	ADE	77	1.555 -14.569 17.407 1.00	
ATOM	788	C2'		77	1.195 -13.347 16.552 1.00	
			<b>-</b>	•	1100	

	57				(00)				58
ATOM	789	03'	ADE	77	2 921	-15.130	17.145	1.00	0.00
ATOM	790	P	GUA	78					
						-14.408	17.546	1.00	0.00
ATOM	791	OP1		78 70		-15.416	17.524	1.00	0.00
ATOM	792	0P2		78 70		-13.571	18.747	1.00	0.00
ATOM	793	05'	GUA	78 70		-13.453	16.289	1.00	0.00
ATOM	794	C5'	GUA	78		-13.990	15.022	1.00	0.00
ATOM	795	C4'	GUA	78		-12.867	13.998	1.00	0.00
ATOM	796	04'	GUA	78		-12.318	13.755	1.00	0.00
ATOM	797	C1'	GUA	78		-11.041	13.208	1.00	0.00
ATOM	798	N9	GUA	78		-10.302	13.222	1.00	0.00
ATOM	799	C8	GUA	78		-10.131	14.257	1.00	0.00
ATOM	800	N7	GUA	78	0.515	-9.542	13.913	1.00	0.00
ATOM	801	C5	GUA	78	0.674	-9.293	12.550	1.00	0.00
ATOM	802	C6	GUA	78	-0.204	-8.679	11.604	1.00	0.00
ATOM	803	06	GUA	78	-1.321	-8.201	11.790	1.00	0.00
ATOM	804	N1	GUA	78	0.334	-8.651	10.321	1.00	0.00
ATOM	805	C2	GUA	78	1.572	-9.153	9.983	1.00	0.00
ATOM	806	N2	GUA	78	1.962	-9.052	8.714	1.00	0.00
ATOM	807	N3	GUA	78	2.400	-9.722	10.865	1.00	0.00
ATOM	808	C4	GUA	78	1.893	-9.760	12.125	1.00	0.00
ATOM	809	C3'	GUA	· 78	5.707	-11.686	14.471	1.00	0.00
ATOM	810	C2 <b>'</b>	GUA	78	4.828	-10.468	14.164	1.00	0.00
ATOM	811	03'	GUA	78	6.942	-11.758	13.782	1.00	0.00
ATOM	812	P	GUA	79	8.205	-10.840	14.170	1.00	0.00
ATOM	813	0P1	GUA	79	9.412	-11.515	13.651	1.00	0.00
ATOM	814	0P2	GUA	79	8.108	-10.553	15.621	1.00	0.00
ATOM	815	05'	GUA	79	7.924	-9.513	13.306	1.00	0.00
ATOM	816	C5'	GUA	79	8.051	-9.547	11.894	1.00	0.00
ATOM	817	C4'	GUA	79	7.350	-8.361	11.227	1.00	0.00
ATOM	818	04'	GUA	79	5.969	-8.340	11.530	1.00	0.00
ATOM	819	C1'	GUA	79	5.511	-7.032	11.279	1.00	0.00
ATOM	820	N9	GUA	79	4.184	-6.811	11.900	1.00	0.00
ATOM	821	C8	GUA	79	3.804	-7.065	13.192	1.00	0.00
ATOM	822	N7	GUA	79	2.574	-6.737	13.466	1.00	0.00
ATOM	823	C5	GUA	79	2.090	-6.236	12.264	1.00	0.00
ATOM	824	C6	GUA	79	0.800	-5.722	11.938	1.00	0.00
ATOM	825	06	GUA	79	-0.167	-5.575	12.680	1.00	0.00
ATOM	826	N1	GUA	. 79	0.688	-5.374	10.597	1.00	0.00
ATOM	827	C2	GUA	79	1.711	-5.474	9.679	1.00	0.00
ATOM	828	N2	GUA	79	1.459	-5.064	8.434	1.00	0.00
ATOM	829	N3	GUA	79	2.937	-5.925	9.987	1.00	0.00
ATOM	830	C4	GUA	79	3.061	-6.297	11.290	1.00	0.00
ATOM	831	C3'	GUA	79	7.888	-6.984	11.644	1.00	0.00
ATOM	832	C2'	GUA	79	6.598	-6.215	11.970	1.00	0.00
ATOM	833	03'	GUA	79	8.630	-6.451	10.558	1.00	0.00
ATOM	834	P	GUA	80	9.302	-4.982	10.585	1.00	0.00
ATOM	835		GUA	80	9.476	-4.559	11.992	1.00	0.00
ATOM	836		GUA	80	10.459	-4.983	9.664	1.00	0.00
ATOM	837	05'		80	8.138	-4.086	9.925	1.00	0.00
ATOM	838	C5'	GUA	80	7.729	-4.302	8.588	1.00	0.00
0	500	50	2011		20		0.000	00	0.00

59 ATOM 839 C4' GUA 80 6.508 -3.4408.262 1.00 0.00 -3.755**ATOM** 840 04' GUA 80 5.448 9.149 1.00 0.00 ATOM 841 C1' GUA 80 4.741 -2.5729.437 1.00 0.00 -2.715ATOM 842 N9 GUA 80 3.923 10.662 1.00 0.00 ATOM 843 68 GUA 80 4.319 -3.09811.918 1.00 0.00 ATOM N7 GUA 3.358 -3.12012.797 1.00 0.00 844 80 -2.722 ATOM 845 C5 GUA 80 2.237 12.077 1.00 0.00 GUA -2.55712.498 0.00 ATOM 846 6 80 0.884 1.00 -2.73113.617 1.00 0.00 **ATOM** 847 06 GUA 80 0.408 0.054 - 2.158ATOM N1 GUA 11.457 1.00 0.00 848 80 0.470 - 1.9291.00 0.00 ATOM 849 C2GUA 80 10.163 N2 GUA -0.451 -1.529 9.282 1.00 0.00 ATOM 850 80 GUA 1.742 -2.072 9.765 1.00 0.00 ATOM 851 N380 ATOM C4 GUA 2.573 -2.47410.767 1.00 0.00 852 80 C3' GUA ATOM 6.769 -1.9358.435 1.00 0.00 853 80 ATOM C2' GUA -1.573854 80 5.880 9.621 1.00 0.00 03' GUA 80 6.354 -1.2207.288 1.00 0.00 ATOM 855 ATOM-05' CYT -8.958 0.940 12.709 1.00 0.00 856 81 ATOM 857 C5' CYT 81 -8.4521.810 11.720 1.00 0.00 ATOM 858 C4' CYT -7.2831.153 10.980 1.00 0.00 81 ATOM 859 04' CYT 81 -6.2890.717 11:883 1.00 0.00 ATOM 860 C1' CYT 81 -5.471-0.18611.173 1.00 0.00 N1 CYT -4.635ATOM 861 81 -1.00412.085 1.00 0.00 **C6** CYT -5.183-1.55313.218 0.00 ATOM 862 81 1.00 ATOM 863 C5 CYT 81 -4.469-2.36514.029 1.00 0.00 **ATOM** 864 C4 CYT 81 -3.102-2.61113.663 1.00 0.00 -3.386ATOM 865 N4 CYT 81 -2.32214.419 1.00 0.00 ATOM 866 N3 CYT 81 -2.584-2.08912.545 1.00 0.00 C2 CYT 81 ... -3.322 -1.298 11.722 ATOM 867 1.00 0.00 ATOM 868 02 CYT 81 -2.827 -0.873 10.680 1.00 0.00 C3' CYT -7.673 -0.11510.206 0.00 ATOM 869 81 1.00 C2' CYT ATOM 870 81 -6.500-1.060 10.468 1.00 0.00 ATOM 03' CYT -7.8490.207 8.835 1.00 871 81 . 0.00 **ATOM** 872 P CYT 82 -8.289 -0.8937.735 1.00 0.00 OP1 CYT -0.195 ATOM 873 82 -9.038 6.666 1.00 0.00 ATOM OP2 CYT -8.909 -2.033 0.00 874 82 8.444 1.00 ATOM 875 05' CYT 82 -6.880-1.3937.126 1.00 0.00 C5' CYT ATOM 876 82 -6.101-0.5616.281 1.00 0.00 ATOM 877 C4' CYT 82 -4.844-1.2995.802 1.00 0.00 ATOM 04' CYT 82 -4.049-1.6666.912 1.00 0.00 878 ATOM 879 C1' CYT 82 -3.493-2.9506.719 1.00 0.00 ATOM -3.317 -3.567 880 N1 CYT 82 8.057 1.00 0.00 -3.583 ATOM 881 C6 CYT 82 -4.3808.917 1.00 0.00 ATOM 882 C5 CYT 82 -4.293 -4.102 10.156 1.00 0.00 ATOM 883 C4CYT 82 -3.019-4.63710.542 1.00 0.00 N4 CYT -2.880-5.223 11.732 0.00 ATOM 884 82 1.00 ATOM 885 N3 CYT 82 -1.970 -4.612 9.705 1.00 0.00 ATOM 886 C2 CYT 82 -2.085-4.0938.447 1.00 0.00 **ATOM** 02 CYT 82 -1.122-4.1081.00 0.00 887 7.684 ATOM C3' CYT 82 -5.164 -2.596888 5.041 1.00 0.00

, t.

```
61
                                                                   62
        889 C2'
ATOM
                 CYT
                         82
                                 -4.577 -3.686
                                                   5.931 1.00 0.00
ATOM
        890
             03' CYT
                         82
                                 -4.574
                                         -2.536
                                                   3.750
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        891 P
                 CYT
                         83
                                 -4.853
                                         -3.647
                                                          1.00
                                                   2.608
                                                                0.00
        892 OP1 CYT
ATOM
                         83
                                 -4.777
                                        -2.982
                                                   1.288
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OP2 CYT
ATOM
        893
                         83
                                 -6.064
                                         -4.412
                                                   2.980
                                                          1.00
                                                                 0.00
             05' CYT
                                 -3.585
                                         -4.627
ATOM
        894
                         83
                                                   2.749
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        895
             C5' CYT
                         83
                                 -2.314
                                         -4.276
                                                   2.228
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C4' CYT
                                         -5.264
ATOM
        896
                         83
                                 -1.266
                                                   2.749
                                                          1.00
                                                                 0.00
             04'
                 CYT
                                 -1.370 -5.305
ATOM
        897
                         83
                                                   4.156
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 CYT
                                 -0.812 -6.508
ATOM
        898
             C1'
                         83
                                                   4.624
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N1
                  CYT
ATOM
        899
                         83
                                 -1.450
                                         -6.881
                                                   5.911
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        900
             C6
                  CYT
                         83
                                  -2.808
                                         -6.777
                                                   6.051
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        901
             C5
                 CYT
                                 -3.420
                                         -7.009
                         83
                                                   7.232 1.00
                                                                 0.00
                                                                 0.00
ATOM
        902
             C4
                  CYT
                         83
                                 -2.583 -7.410
                                                   8.327 1.00
ATOM
        903
             N4
                  CYT
                                 -3.121
                                         -7.671
                                                   9.519
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         83
ATOM
        904
             N3
                  CYT
                         83
                                  -1.259
                                         -7.566
                                                   8.171
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C2
                                         -7.310
ATOM
        905
                  CYT
                         83
                                  -0.661
                                                   6.972
                                                          1.00 0.00
             02
                 CYT
ATOM
        906
                         83
                                  0.548
                                         -7.475
                                                   6.834
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C3,
                  CYT
                                         -6.711
ATOM
        907
                         83
                                  -1.498
                                                   2.289
                                                           1.00
                                                                 0.00
        908
             C2'
                 CYT
                                  -1.162 -7.525
                                                          1.00
ATOM
                         83
                                                   3.542
                                                                 0.00
             03'
                 •CYT
ATOM
        909
                                  -0.668
                                         -7.041
                                                           1.00 0.00
                         83
                                                    1.187
             P
                  THY
ATOM
        910
                         84
                                  -0.752 -8.474
                                                   0.429
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP1 THY
ATOM
                                  -0.019
                                         -8.364
                                                   -0.850
                                                           1.00
                                                                 0.00
        911
                         84
             OP2 THY
ATOM
        912
                                  -2.161
                                         -8.926
                                                    0.428
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        913
              05'
                 THY
                                   0.082
                                         -9.470
                                                    1.386
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         84
             C5' THY
                                   1.478 -9.312
ATOM
        914
                         84
                                                    1.569
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             C4'
                  THY
                                   1.983 -10.261
                                                           1.00
                                                                 0.00
        915
                                                    2.660
                         84
             04'
ATOM
                  THY
                                   1.304 -10.016
                                                           1.00
                                                                 0.00
        916
                         84
                                                    3.881
             C1'
                  THY
                                   1.135 -11.230
ATOM
        917
                                                    4.576
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         84,
             N1
                  THY
                                   0.048 -11.091
                                                                 0.00
ATOM
        918
                         84
                                                    5.591
                                                           1.00
        919
              C6
                  THY
                                  -1.214 -10.701
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
                                                    5.204
                         84
                                                           1.00
ATOM
         920
              C5
                  THY
                                  -2.213 -10.551
                                                    6.107
                                                                 0.00
                         84
ATOM
         921
              C7
                  THY
                         84
                                  -3.585 -10.199
                                                    5.560
                                                           1.00
                                                                 0.00
         922
              C4
                  THY
                                  -1.992 -10.760
                                                           1.00
ATOM
                         84
                                                    7.522
                                                                 0.00
         923
              04
                  THY
                                  -2.835 -10.608
                                                    8.398
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         84.
ATOM
         924
              N3
                  THY
                                  -0.709 -11.170
                                                    7.844
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         84
ATOM
         925
              C2
                  THY
                         84
                                   0.332 - 11.349
                                                    6.939
                                                           1.00
                                                                 0.00
         926
              02
                  THY
                                   1.432 -11.718
ATOM
                         84
                                                    7.338
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C3'
ATOM
         927
                  THY
                          84
                                   1.747 -11.742
                                                    2.326
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C2'
                  THY
ATOM
         928
                                   0.776 - 12.177
                                                    3.428
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         84
              03'
ATOM
         929
                  THY
                         84
                                   2.994 -12.419
                                                    2.346
                                                           1.00
                                                                 0.00
              P
                  ADE
                                   3.140 -13.982
                                                    1.972
ATOM
         930
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          85
              OP1 ADE
                                   4.548 -14.256
ATOM
         931
                          85
                                                    1.614
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         932
              OP2 ADE
                          85
                                   2.086 -14.344
                                                    0.997
                                                           1.00
                                                                 0.00
             05'
                  ADE
ATOM
         933
                          85
                                   2.819 -14.701
                                                    3.367
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C5'
                  ADE
                                   3.663 -14.506
ATOM
         934
                          85
                                                    4.484
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C4'
                  ADE
                                   3.005 -15.065
ATOM
         935
                          85
                                                    5.743
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         936
              04' ADE
                                   1.814 -14.373
                                                    6.066
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          85
ATOM
         937
              C1'
                  ADE
                          85
                                   0.982 - 15.288
                                                    6.742
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         938
              N9
                  ADE
                          85
                                  -0.398 -14.783
                                                    6.864 1.00 0.00
```

```
63
                                                                   64
ATOM
        939
             68
                 ADE
                                 -1.215 -14.261
                                                   5.894
                                                          1.00 0.00
                         85
ATOM
        940
             N7
                 ADE
                         85
                                 -2.362 -13.824
                                                   6.336
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        941
             C5
                 ADE
                         85
                                 -2.307 -14.093
                                                   7.700
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        942
             60
                 ADE
                         85
                                 -3.190 -13.850
                                                   8.772
                                                          1.00 0.00
ATOM
        943
             N6
                 ADE
                         85
                                 -4.354 -13.210
                                                   8.639
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        944
             N1
                 ADE
                         85
                                 -2.834 -14.265
                                                   9.997
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C2
                 ADE
ATOM
        945
                         85
                                 -1.666 - 14.874
                                                  10.160
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N3
                 ADE
                                  -0.734 -15.135
ATOM
        946
                         85
                                                   9.256
                                                           1.00
                                                                0.00
             C4
                 ADE
                                 -1.123 -14.709
                                                                 0.00
ATOM
        947
                         85
                                                   8.024
                                                           1.00
                                   2.590 -16.537
             C3'
                 ADE
                                                   5.606
ATOM
        948
                         85
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        949
             C2'
                 ADE
                         85
                                   1.076 -16.472
                                                   5.794
                                                           1.00
                                                                 0.00
             03'
                  ADE
                                   3.198 -17.246
ATOM
        950
                         85
                                                   6.662 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        951
             P
                  ADE
                         86
                                   3.407 -18.832
                                                   6.613 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        952
             OP1 ADE
                                   2.506 -19.404
                                                    5.594 1.00
                                                                 0.00
                         86
             OP2 ADE
ATOM
        953
                         86
                                   4.864 -19.084
                                                    6.513 1.00
                                                                 0.00
ATOM
             05' ADE
        954
                         86
                                   2.889 - 19.301
                                                    8.048 1.00
                                                                 0.00
             C5' ADE
ATOM
        955
                                   3.627 -19.003
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         86
                                                   9.207
ATOM
        956
             C4' ADE
                                   2.821 -19.367
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         86
                                                  10.448
ATOM
        957
             04'
                 ADE
                         86
                                   1.606 -18.640
                                                  10.422
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        958
             C1'
                 ADE
                                   0.502 -19.509
                                                  10.536
                         86
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        959
             N9
                  ADE
                         86
                                  -0.614 -18.955
                                                   9.732 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        960
             68
                 ADE
                         86
                                  -0.708 -18.838
                                                   8.365
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                  ADE
        961
             N7
                         86
                                  -1.797 - 18.256
                                                   7.945
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C5
                  ADE
ATOM
        962
                         86
                                  -2.476 -17.959
                                                    9.119
                                                          1.00
                                                                 0.00
             60
                  ADE
ATOM
        963
                         86
                                  -3.716 -17.344
                                                   9.375 1.00
                                                                 0.00
                                  -4.509 -16.900
ATOM
        964
              N6
                  ADE
                         86
                                                    8.399
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        965
             N1
                  ADE
                         86
                                  -4.116 -17.202
                                                  10.653
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C2
                  ADE
                                  -3.315 -17.626
                                                  11.626
        966
                         86
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        967
              N3
                  ADE
                         86
                                  -2.123 -18.205
                                                  11.519
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        968
              C4
                  ADE
                         86
                                  -1.755 -18.357
                                                  10.217
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C3'
                  ADE
ATOM
        969
                         86
                                   2.456 - 20.852
                                                  10.538
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C2' ADE
                                                  10.005
        970
                         86
                                   1.022 - 20.845
                                                           1.00
                                                                 0.00
              03'
                  ADE
ATOM
        971
                                   2.578 -21.256
                                                  11.892
                                                           1.00
                         86
                                                                 0.00
ATOM
        972
             P
                  CYT
                         87
                                   2.227 -22.747
                                                  12.385
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OP1 CYT
                                   2.248 -23.643
ATOM
        973
                         87
                                                  11.206
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                                  13.552
ATOM
        974
              OP2 CYT
                         87
                                   3.078 -23.067
                                                          1.00
                                                                 0.00
              05' CYT
                                   0.717 -22.542 12.908
ATOM
        975
                         87
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                                  14.062
ATOM
        976
              C5' CYT
                         87
                                   0.488 - 21.753
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        977
              C4' CYT
                         87
                                  -0.985 -21.398
                                                  14.256
                                                           1.00
                                                                 0.00
              04' CYT
ATOM
        978
                         87
                                  -1.556 - 20.878
                                                  13.079
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        979
              C1' CYT
                         87
                                  -2.943 -21.145
                                                  13.087
                                                           1.00
                                                                 0.00
              N1
                  CYT
                                  -3.468 -21.102 11.698
ATOM
         980
                         87
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              60
                 CYT
                         87
                                  -2.691 -21.537
                                                  10.657
                                                           1.00
                                                                 0.00
         981
ATOM
              C5
                 CYT
                                  -3.054 -21.332
         982
                         87
                                                   9.371
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         983
              C4
                  CYT
                         87
                                  -4.291 -20.648
                                                    9.139
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              N4
                  CYT
                                  -4.662 -20.340
         984
                         87
                                                    7.891
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         985
              N3
                  CYT
                         87
                                  -5.073 -20.271
                                                  10.164
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C2
                 CYT
                                  -4.715 -20.534
         986
                         87
                                                  11.460
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                                                 0.00
ATOM
         987
              02
                  CYT
                         87
                                  -5.475 -20.265
                                                  12.393
                                                           1.00
ATOM
             C3' CYT
```

87

-1.881 -22.564 14.692 1.00 0.00

```
65
                                                                   66
ATOM
        989 C2' CYT
                         87
                                 -2.989 -22.556 13.646 1.00 0.00
ATOM
        990
            03' CYT
                         87
                                 -2.321 -22.232
                                                 16.002
                                                         1.00
                                                                0.00
        991 P
                 CYT
ATOM
                         88
                                 -3.035 -23.272 17.001
                                                         1.00
                                                                 0.00
        992 OP1 CYT
ATOM
                         88
                                 -2.494 -24.624
                                                  16.742 1.00
                                                                 0.00
             OP2 CYT
                                 -2.948 -22.692 18.363
ATOM
        993
                         88
                                                          1.00
                                                                 0.00
        994
             05' CYT
                                 -4.572 -23.229
                                                  16.528
ATOM
                         88
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        995
             C5'
                 CYT
                         88
                                 -5.427 -22.170
                                                  16.919
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        996
             C4'
                 CYT
                         88
                                 -6.726 -22.198
                                                  16.108
                                                          1.00
                                                                 0.00
             04'
ATOM
        997
                 CYT
                         88
                                 -6.455 -22.051
                                                  14.734
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        998
             C1'
                 CYT
                         88
                                 -7.597 -22.489
                                                  14.037
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N1
                 CYT
                                 -7.252 -22.762
ATOM
        999
                         88
                                                  12.623
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                 -6.101 -23.440
ATOM
       1000
             C6
                 CYT
                         88
                                                  12.321
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C5
                 CYT
ATOM
       1001
                         88
                                 -5.688 -23.615
                                                 11.049
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 CYT
ATOM
       1002
             C4
                         88
                                 -6.533 -23.073
                                                  10.015
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 CYT
                                 -6.211 -23.161
ATOM
       1003
             N4
                         88
                                                  8.723
                                                           1.00
                                                                 0.00
             N3
                 CYT
                                                  10.320
ATOM
       1004
                         88
                                 -7.676 -22.439
                                                          1.00
                                                                 0.00
       1005
             C2
                 CYT
                                 -8.061 -22.263
                                                  11.612
ATOM
                         88
                                                          1.00
                                                                 0.00
             02
                 CYT
                                 -9.110 -21.678
                                                  11.861
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1006
                         88
             C3,
                 CYT
ATOM
       1007
                                 -7.527 -23.506
                                                  16.211
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         88
ATOM
       1008
             C2'
                 CYT
                                 -7.937 -23.783
                                                  14.761
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         88
ATOM
       1009
             03'
                 CYT
                                  -8.615 -23.292
                                                  17.094
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         88
       1010 P
                  CYT
                                 -9.769 -24.391
                                                  17.354
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         89
ATOM
       1011
             OP1 CYT
                                 -9.244 -25.723
                                                  16.982
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         89
ATOM
       1012
             OP2 CYT
                                 -10.323 -24.168
                                                  18.707
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         89
ATOM
       1013
             05' CYT
                                 -10.892 -23.974
                                                  16.274
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         89
             C5' CYT
ATOM
       1014
                         89
                                 -11.571 -22.733
                                                  16.356
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1015
             C4' CYT
                         89
                                 -12.551 -22.588
                                                  15.187
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1016
              04' CYT
                         89
                                 -11.853 -22.685
                                                  13.962
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1017
             C1'
                 CYT
                         89
                                 -12.652 -23.325
                                                  12.989
                                                           1.00
                                                                 0.00
             N1
                  CYT
                                 -11.742 -24.005
                                                  12.029
                                                                 0.00
ATOM
        1018
                         89
                                                           1.00
ATOM
        1019
             C6
                  CYT
                         89
                                 -10.685 -24.730
                                                  12.514
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1020
              C5
                  CYT
                                  -9.724 -25.219
                                                  11.704
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         89
ATOM
        1021
              C4
                  CYT
                         89
                                  -9.868 -24.960
                                                  10.299
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  CYT
ATOM
        1022
              N4
                         89
                                  -8.944 -25.390
                                                    9.438
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1023
              N3
                  CYT
                          89
                                 -10.933 -24.299
                                                   9.818
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1024
              C2
                  CYT
                          89
                                 -11.899 -23.820
                                                  -10.657
                                                           1.00
                                                                 0.00
              02
                  CYT
                                 -12.887 -23.256
ATOM
        1025
                          89
                                                  10.196
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C3' CYT
ATOM
        1026
                                 -13.617 -23.693
                                                  15.174
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          89
ATOM
        1027
              C2' CYT
                          89
                                 -13.453 -24.337
                                                  13.798
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1028
              03' CYT
                          89
                                 -14.892 -23.102
                                                  15.380
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                                  15.499
        1029
                  THY
                                 -16.253 -23.967
ATOM
              Р
                          90
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1030
              OP1 THY
                          90
                                 -17.226 -23.190
                                                  16.298
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OP2 THY
ATOM
        1031
                          90
                                 -15.905 -25.348
                                                  15.902
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1032
              05' THY
                          90
                                 -16.776 -24.007
                                                  13.974
                                                           1.00
                                                                 0.00
        1033
              C5'
                  THY
                                 -17.220 -22.832
                                                  13.319
                                                                 0.00
ATOM
                          90
                                                           1.00
              C4' THY
ATOM
        1034
                          90
                                 -17.490 -23.128
                                                  11.842
                                                           1.00
                                                                 0.00
              04'
                  THY
                                 -16.312 -23.633 11.243
ATOM
        1035
                          90
                                                           1.00
                                                                 0.00
        1036
              C1'
                  THY
                                 -16.658 -24.575
                                                  10.255
                                                                 0.00
ATOM
                          90
                                                           1.00
 ATOM
        1037
              N1
                  THY
                          90
                                 -15.479 -25.450
                                                  10.012
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                 -14.899 -26.117 11.064 1.00 0.00
 ATOM
        1038
              C6
                  THY
                          90
```

```
67
                                                                   68
ATOM
       1039 C5
                 THY
                         90
                                -13.751 -26.816
                                                 10.909
                                                         1.00 0.00
                                -13.225 -27.549
ATOM
       1040
            C7
                 THY
                         90
                                                  12.129
                                                          1.00
                                                                0.00
                  THY
                                -13.066 -26.865
                                                   9.637
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1041 C4
                         90
ATOM
       1042 04
                  THY
                         90
                                -11.994 -27.426
                                                   9.439
                                                          1.00
                                                                 0.00
            N3
                 THY
                                -13.723 -26.196
                                                   8.611
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1043
                         90
                  THY
                                -14.927 -25.516
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1044
             C2
                         90
                                                   8.731
                 THY
            02
                                -15.461 -25.022
                                                   7.741
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1045
                         90
             C3'
                 THY
                                -18.577 -24.193
                                                  11.623
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1046
                         90
             C2' THY
                                -17.823 -25.318
                                                  10.910
                                                          1.00
                                                                 0.00
       1047
                         90
ATOM
       1048
             03'
                 THY
                                -19.623 -23.632
                                                  10.846
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         90
       1049 P
                  ADE
                                -21.018 -24.405
                                                  10.578
ATOM
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         91
ATOM
       1050 OP1 ADE
                         91
                                -22.032 -23.405
                                                  10.179
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OP2 ADE
                                -21.285 -25.308
                                                  11.719 1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1051
                         91
ATOM
       1052
             05' ADE
                         91
                                -20.671 -25.308
                                                   9.293
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C5'
ATOM
       1053
                 ADE
                                -20.544 -24.733
                                                   8.008
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         91
ATOM
       1054
             C4'
                  ADE
                                -19.927 -25.733
                                                   7.029
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         91
ATOM
       1055
             04'
                 ADE
                         91
                                -18.622 -26.101
                                                   7.418
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1056
              C1' ADE
                         91
                                 -18.297 -27.260
                                                    6.687
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                                           1.00
              N9
                  ADE
                                -17.125 -27.928
                                                                 0.00
ATOM
       1057
                         91
                                                    7.280
ATOM
       1058
              68
                  ADE
                         91
                                 -16.905 -28.224
                                                    8.599
                                                           1.00
                                                                 0.00
              N7
                  ADE
                                 -15.743 -28.767
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1059
                         91
                                                   8.839
ATOM
        1060
              C5
                  ADE
                         91
                                 -15.162 -28.858
                                                   7.577
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  ADE
                                 -13.922 -29.343
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1061
              C6
                         91
                                                    7.118
              N6
                                 -12.989 -29.828
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1062
                  ADE
                         91
                                                    7.942
              N1
                  ADE
                                 -13.677 -29.342
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1063
                         91
                                                    5.793
ATOM
        1064
              C2
                  ADE
                                 -14.604 -28.864
                                                    4.968
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         91
ATOM
        1065
              N3
                  ADE
                         91
                                 -15.789 -28.348
                                                    5.273
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1066
              C4
                  ADE
                         91
                                 -16.012 -28.375
                                                    6.615
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C3' ADE
                                 -20.684 -27.065
                                                                 0.00
ATOM
        1067
                         91
                                                    6.916
                                                           1.00
ATOM
        1068
              C2' ADE
                         91
                                 -19.554 -28.101
                                                    6.863
                                                           1.00
                                                                 0.00
              03' ADE
                                 -21.499 -27.019
ATOM
        1069
                                                    5.754
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         91
ATOM
        1070
             P
                  ADE
                         92
                                 -22.380 -28.271
                                                    5.238
                                                           1.00
                                                                 0.00
        1071
              OP1 ADE
                                 -22.713 -29.129
ATOM
                         92
                                                    6.396
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1072
             OP2 ADE
                          92
                                 -23.460 -27.748
                                                    4.371
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1073
              05' ADE
                          92
                                 -21.330 -29.063
                                                    4.306
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C5'
                  ADE
ATOM
        1074
                          92
                                 -20.766 -28.452
                                                    3.160
                                                           1.00
                                                                  0.00
        1075
              C4'
                  ADE
                                 -19.663 -29.336
ATOM
                          92
                                                    2.573
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1076
              04'
                  ADE
                          92
                                 -18.628 -29.532
                                                    3.524
                                                           1.00
                                                                  0.00
        1077
              C1' ADE
                                 -18.138 -30.848
                                                    3.395
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
                          92
ATOM
        1078
              N9
                  ADE
                          92
                                 -17.420 -31.263
                                                    4.621
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1079
              C8
                  ADE
                          92
                                 -17.870 -31.239
                                                    5.917
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  ADE
ATOM
        1080
              N7
                          92
                                 -16.996 -31.632
                                                    6.801
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C5
                  ADE
                          92
                                 -15.886 -31.954
                                                                 0.00
ATOM
        1081
                                                    6.032
                                                          1.00
                                 -14.610 -32.452
ATOM
        1082
              60
                  ADE
                          92
                                                    6.360
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1083
              N6
                  ADE
                          92
                                 -14.248 -32.693
                                                    7.621
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  ADE
                                 -13.734 -32.694
 ATOM
        1084
              N1
                          92
                                                    5.367
                                                           1.00
                                                                  0.00
        1085
              C2
                  ADE
                          92
                                 -14.110 -32.453
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
                                                    4.113
              N3
                                 -15.274 -31.984
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
        1086
                  ADE
                          92
                                                    3.673
 ATOM
        1087
              C4
                  ADE
                          92
                                 -16.134 -31.745
                                                    4.699
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
        1088
              C3' ADE
                          92
                                 -20.160 -30.739
                                                    2.186 1.00
                                                                 0.00
```

ATOM 11 CA LYS 2 ATOM CB LYS 2 12 LYS 2 ATOM CG 19.232 -16.206 30.077 13 1.000.00ATOM CD LYS 2 20.702 -15.882 29.763 1.00 14 0.00 LYS 2 ATOM 15 CE 20.965 -14.410 29.406 1.00 0.00 NZ LYS 2 0.00 ATOM 16 20.808 -14.130 27.963 1.00 C LYS 2 15.925 -15.811 ATOM 17 28.097 1.00 0.00 ATOM 18 0 LYS 2 15.028 -15.030 28.406 1.00 0.00 ATOM N HIS 3 16.163 -16.204 26.844 19 1.00 0.00 **ATOM** CA HIS 3 15.410 -15.752 25.687 1.00 0.00 20 HIS ATOM 21 CB 3 16.271 -15.950 24.431 1.00 0.00 ATOM 22 CG HIS 3 17.695 -15.477 24.620 1.00 0.00 ND1 HIS ATOM 3 18.780 -16.103 24.026 23 1.00 0.00 ATOM CE1 HIS 3 19.884 -15.440 24.411 1.00 0.00 ATOM NE2 HIS 3 19.618 -14.413 25.223 25 1.00 0.00 ATOM CD2 HIS 25.348 3 18.233 -14.441 1.00 0.00 26 ATOM C HIS 3 27 14.071 -16.484 25.605 1.00 0.00 ATOM 0 HIS 26.268 28 3 13.878 -17.504 1.00 0.00 ATOM 29 N ARG 4 13.151 -15.946 24.796 1.00 0.00 ATOM 30 CA ARG 24.593 4 11.813 -16.484 1.00 0.00 ATOM 31 CB ARG 4 10.772 -15.651 25.368 1.00 0.00 ATOM CG ARG 11.138 -15.404 26.843 1.00 0.00 4 ATOM CDARG 27.700 33 4 11.144 -16.681 1.00 0.00 ATOM NE ARG 12.215 -16.658 28.709 34 4 1.00 0.00 ATOM CZARG 12.227 -15.914 29.827 35 4 1.00 0.00 ATOM NH1 ARG 13.252 -16.030 30.678 1.00 0.00 NH2 ARG 11.224 -15.067 30.095 1.00 ATOM 37 4 0.00 ATOM 38 C ARG 11.519 -16.527 23.092 1.00 0.00 ATOM 0 ARG 11.255 ~17.599 22.555 39 4 1.00 0.00 ATOM 40 N ALA 11.581 -15.364 22.427 1.00 0.00 ATOM CA ALA 5 11.355 -15.196 20.996 41 1.00 0.00 ATOM 42 CB ALA 5 12.495 -15.830 20.190 1.00 0.00 ATOM C 43 ALA 5 9.979 -15.714 20.567 1.00 0.00 **ATOM** 0 ALA 5 9.852 -16.841 44 20.093 1.00 0.00 ATOM N ARG 8.949 -14.876 20.728 45 6 1.00 0.00 ATOM 46 CA ARG 6 7.582 -15.217 20.358 1.00 0.00 ATOM 47 CBARG 6.601 -14.241 21.039 6 1.00 0.00 ATOM 48 CG ARG 6 5.325 - 14.95321.512 1.00 0.00 ATOM CD ARG 4.373 -13.941 22.159 1.00 0.00 **ATOM** NE ARG 3.178 -14.590 22.725 50 6 1.00 0.00 ATOM 51 CZARG 6 1.983 -14.729 22.119 1.00 0.00 ATOM NH1 ARG 52 1.804 -14.369 20.844 1.00 6 0.00 **ATOM** 53 NH2 ARG 6 0.949 - 15.22922.807 1.00 0.00 ATOM C ARG 7.480 -15.210 18.829 1.00 54 6 0.00 ATOM 0 ARG 6 7.227 -14.166 18.232 55 1.00 0.00 N ATOM LYS 7 7.702 - 16.37418.204 1.00 56 0.00 ATOM CA7 7.648 -16.568 16.762 57 LYS 1.00 0.00 ATOM CB LYS 9.024 -16.342 16.111 1.00 0.00 ATOM CG LYS 7 59 9.399 -14.858 16.187 1.00 0.00

71

ATOM

60 CD LYS

7

10.370 -14.417 15.086

1.00 0.00

	73				(00)			74
ATOM		CE	LVC	7	10 446 12 006	15 110	1 00	74
ATOM	61	CE	LYS	7	10.446 -12.886	15.118	1.00	0.00
ATOM	62	NZ	LYS	7	11.017 -12.318	13.885	1.00	0.00
ATOM	63	C	LYS	7	7.089 -17.954	16.448	1.00	0.00
ATOM	64		LYS	7	7.403 -18.928	17.130	1.00	0.00
ATOM	65	N	ARG	8	6.249 -18.019	15.409	1.00	0.00
ATOM	66	CA	ARG	. 8	5.589 -19.226	14.933	1.00	0.00
ATOM	67	CB	ARG	8	4.271 -18.825	14.252	1.00	0.00
ATOM	68	CG	ARG	8	3.425 -17.899	15.138	1.00	0.00
ATOM	69	CD	ARG	8	2.008 -17.691	14.586	1.00	0.00
ATOM	70	NE	ARG	8	1.965 -17.058	13.258	1.00	0.00
ATOM	71	CZ	ARG	8	2.178 -15.758	12.995	1.00	0.00
ATOM	72	NH1	ARG	8	2.575 -14.930	13.966	1.00	0.00
ATOM	73	NH2	ARG	8	1.985 -15.274	11.763	1.00	0.00
ATOM	74	C	ARG	8	6.512 -19.983	13.967	1.00	0.00
ATOM	75	0	ARG	8	7.638 -19.548	13.720	1.00	0.00
ATOM	76	N	GLN	9	6.048 -21.108	13.406	1.00	0.00
ATOM	77	CA	GLN	9	6.840 -21.894	12.470	1.00	0.00
ATOM	78	CB	GLN	9	6.336 -23.345	12.394	1.00	0.00
ATOM	79	CG	GLN	9	6.375 -24.078	13.740	1.00	0.00
ATOM	80	CD	GLN	9	7.800 -24.259	14.252	1.00	0.00
ATOM	81		GLN	9	8.190 -23.659	15.250	1.00	0.00
ATOM	82		GLN	9	8.586 -25.088	13.567	1.00	0.00
ATOM	83	С	GLN	9	6.819 -21.220	11.097	1.00	0.00
ATOM	84	0	GLN	9	6.099 -21.643	10.194	1.00	0.00
ATOM	85	N	ALA	10	7.632 -20.167	10.947	1.00	0.00
ATOM	86	CA	ALA	10	7.766 -19.424	9.704	1.00	0.00
ATOM	87	CB	ALA	10	8.727 -18.249	9.906	1.00	0.00
ATOM	88	C	ALA	10	8.275 -20.369	8.618	1.00	0.00
ATOM	89	0	ALA	10	9.300 -21.024	8.809	1.00	0.00
ATOM	90	N	TRP	11	7.562 -20.454	7.490	1.00	0.00
ATOM	91	CA	TRP	11	7.967 -21.327	6.401	1.00	0.00
ATOM	92	СВ	TRP	11	6.814 -21.493	5.409	1.00	0.00
ATOM	93	CG	TRP	11	5.643 -22.333	5.839	1.00	0.00
ATOM	94		TRP	11	4.726 -22.024	6.785	1.00	0.00
ATOM			TRP	11	3.787 -23.030	6.888	1.00	0.00
ATOM	95 96		TRP		4.058 -24.056	6.006	1.00	0.00
			TRP	11		5.719		
ATOM	97			11	3.421 -25.274		1.00	0.00
ATOM	98		2 TRP	11	3.969 -26.119	4.745		0.00
ATOM	99		TRP	11	5.138 -25.742		1.00	
ATOM	100		TRP	11	5.762 -24.515	4.353	1.00	0.00
ATOM	101		TRP	11	5.243 -23.639	5.328	1.00	0.00
ATOM	102	C	TRP	11	9.235 -20.777	5.731	1.00	0.00
ATOM	103	0 N	TRP	11	9.545 -19.589	5.838	1.00	0.00
ATOM	104	N	LEU	12	9.973 -21.658	5.051	1.00	0.00
ATOM	105	CA	LEU	12	11.216 -21.364	4.350	1.00	0.00
ATOM	106	CB	LEU	12	12.425 -21.609	5.269	1.00	0.00
ATOM	107	CG	LEU	12	12.593 -23.059	5.775	1.00	0.00
ATOM	108		LEU	12	14.057 -23.282	6.168	1.00	0.00
ATOM	109		2 LEU	12	11.715 -23.378	6.995	1.00	0.00
ATOM	110	C	LEU	12	11.276 -22.224	3.089	1.00	0.00

75 76 10.468 -23.142 2.956 1.00 0.00 ATOM 111 0 LEU 12 ATOM N TRP 12.211 -21.954 2.162 1.00 0.00 112 13 ATOM 113 CA TRP 12.283 -22.736 0.931 13 1.00 0.00 **ATOM** 114 CB TRP 13 13.300 -22.246 -0.104 1.00 0.00 ATOM CG TRP 14.747 -22.488 0.186 1.00 0.00 115 13 ATOM 116 CD1 TRP 13 15.577 -21.500 0.542 1.00 0.00 ATOM NE1 TRP 16.849 -21.981 1.00 0.00 117 13 0.757 ATOM 118 CE2 TRP 13 16.898 -23.343 0.535 1.00 0.00 ATOM 119 CZ2 TRP 13 17.936 -24.284 0.615 1.00 0.00 ATOM 120 CH2 TRP 13 17.667 -25.629 0.321 1.00 0.00 ATOM 121 CZ3 TRP 16.369 -26.015 -0.0531.00 0.00 13 ATOM 122 CE3 TRP 13 15.337 -25.064 -0.135 1.00 0.00 CD2 TRP 15.567 -23.702 **ATOM** 123 13 0.161 1.00 0.00 ATOM 124 C TRP. 13 12.433 -24.228 1.157 1.00 0.00 ATOM 125 0 TRP 12.045 -24.972 0.279 1.00 0.00 13 **ATOM** 126 N GLU 14 12.968 -24.728 2.271 1.00 0.00 ATOM 127 CA GLU 14 13.034 -26.177 2.389 1.00 0.00 ATOM 128 CB GLU 14 13.801 -26.592 3.648 1.00 0.00 ATOM 129 CG GLU 15.252 -26.099 3.581 1.00 0.00 14 **ATOM** 130 CD GLU 14 16.062 -26.585 4.776 1.00 0.00 OE1 GLU ATOM 131 14 16.407 -27.786 4.774 1.00 0.00 ATOM 132 OE2 GLU 14 16.319 -25.747 5.666 1.00 0.00 С ATOM 133 GLU 14 11.608 -26.734 2.328 1.00 0.00 ATOM 134 0 GLU 14 11.293 -27.561 1.472 1.00 0.00 N GLU ATOM 135 15 10.745 -26.238 3.213 1.00 0.00 ATOM 136 CA GLU 15 9.354 -26.636 3.270 1.00 0.00 GLU ATOM 137 CB 15 8.718 -26.081 1.00 0.00 4.547 CG GLU **ATOM** 138 15 9.454 -26.508 5.821 1.00 0.00 ATOM 139 CD GLU 8.664 -26.094 7.054 1.00 0.00 15 OE1 GLU ATOM 140 15 8.228 -24.925 7.106 1.00 0.00 ATOM OE2 GLU 8.470 -26.961 141 15 7.936 1.00 0.00 ATOM 142 С GLU 8.583 -26.194 2.018 1.00 0.00 15 ATOM 143 0 GLU 7.884 -27.006 1.424 1.00 0.00 15 N ASP 8.692 -24.922 ATOM 144 16 1.613 1.00 0.00 CA ASP 7.986 -24.363 1.00 0.00 ATOM 145 16 0.459 **ATOM** 146 CBASP 8.125 -22.837 0.414 1.00 0.00 16 ATOM 147 CG ASP 16 7.434 -22.142 1.573 1.00 0.00 OD1 ASP 6.275 -22.506 ATOM 148 16 1.858 1.00 0.00 ATOM 149 OD2 ASP 16 8.045 -21.202 2.127 1.00 0.00 C 8.431 -24.944 ATOM 150 ASP -0.8821.00 0.00 16 ATOM 151 0 ASP 16 7.593 -25.262 -1.7241.00 0.00 **ATOM** 152 N LYS 17 9.743 -25.077 -1.1021.00 0.00 CA LYS 10.289 -25.621 -2.339ATOM 153 17 1.00 0.00 ATOM 154 CB LYS 17 11.822 -25.441 -2.4151.00 0.00 CG LYS ATOM 155 17 12.351 -25.690 -3.8331.00 0.00 CD LYS 13.880 -25.553 -3.892ATOM 156 17 1.00 0.00 ATOM 157 CE LYS 17 14.596 -26.783 -3.313 1.00 0.00 ATOM 158 NZ LYS 17 16.058 -26.595 -3.2901.00 0.00 ATOM C LYS 17 9.820 -27.078 -2.4371.00 0.00 159 9.391 -27.525 -3.502 1.00 ATOM 160 0 LYS 17 0.00

77 ATOM N ASN 9.862 -27.814 -1.318 1.00 0.00 161 18 ATOM CA ASN 9.377 -29.185 -1.283 1.00 162 18 ATOM 163 CB ASN 9.718 -29.816 0.064 1.00 18 ATOM 164 CG ASN 18 11.165 -30.288 0.193 1.00 ATOM 165 OD1 ASN 18 12.008 -29.995 -0.652 1.00 ATOM 166 ND2 ASN 18 11.459 -31.039 1.256 ATOM C ASN 18 7.857 -29.228 -1.499167 ATOM 168 0 ASN 18 7.369 -30.093 -2.220 ATOM 169 N LEU 19 7.103 -28.312 -0.883 ATOM 170 CA LEU 19 5.649 -28.221 -0.985LEU 5.148 -27.058 ATOM 171 CB 19 -0.108ATOM 172 CG LEU 19 3.663 -26.689 -0.247CD1 LEU 0.306 **ATOM** 173 19 2.737 -27.774 ATOM 174 CD2 LEU 19 3.401 -25.379 0.507 5.244 -28.055 **ATOM** 175 C LEU 19 -2.447ATOM 176 0 LEU 19 4.519 -28.892 -2.982ATOM 177 N ARG 20 5.714 -26.982 -3.093**ATOM** 178 CA ARG 20 5.403 -26.700 -4.4875.938 -25.321 -4.888ATOM 179 CB ARG 20 CG ARG 7.440 -25.288 ATOM 180 20 -5.149-5.252CD ARG 7.932 -23.844 ATOM 181 20 ATOM 182 NE ARG 20 9.354 -23.815 -5.612CZARG 10.028 -22.702 -5.934ATOM 183 20 NH1 ARG -6.505ATOM 184 20 11.232 -22.790 NH2 ARG 9.485 -21.492 -5.763ATOM 185 20 C ARG 5.864 -27.853 -5.385ATOM 186 20 5.139 -28.245 -6.299ATOM 187 0 ARG 20 N SER 7.047 -28.427 -5.103ATOM 188 21 CA SER 7.551 -29.576 -5.844ATOM 189 21 8.908 -30.034 -5.286 **ATOM** 190 CB SER 21 0CSER 9.322 -31.252 -5.880 **ATOM** 191 21 **ATOM** 192 C SER 6.521 -30.702 -5.75021 ATOM 193 0 SER 21 6.164 -31.290 -6.763GLY 6.040 -30.990 -4.538ATOM 194 N 22 CA GLY 5.053 -32.016 -4.265ATOM 195 22 ATOM 196 C GLY 22 3.759 -31.767 -5.038ATOM 197 0 GLY 22 3.247 - 32.680-5.684N VAL 3.250 -30.530 -4.981ATOM 198 23 ATOM 199 CAVAL 23 2.042 -30.122 -5.688 CBVAL 1.742 -28.631 ATOM 200 23 -5.427ATOM 201 CG1 VAL 23 0.658 - 28.102-6.373ATOM 202 CG2 VAL 23 1.262 -28.420 -3.9871.00 0.00 C VAL 23 2.201 -30.423 -7.179 0.00 ATOM 203 1.00 ATOM 204 0 VAL 23 1.293 -30.970 -7.7971.00 0.00 ATOM 205 N ARG 24 3.352 -30.075 -7.7611.00 0.00 -9.170ATOM 206 CA ARG 3.621 - 30.3161.00 0.00 24 CBARG 4.907 -29.559 -9.572ATOM 207 24 1.00 0.00 208 CG ARG 5.002 -29.139 -11.051 1.00 0.00 ATOM 24 ATOM 209 CD ARG 24 5.566 -30.203 -12.003 1.00 0.00 ATOM 210 NE ARG 24 4.636 -31.320 -12.187 1.00 0.00

```
79
                                                                   80
ATOM
        211 CZ ARG
                         24
                                  4.915 -32.489 -12.780
                                                          1.00 0.00
ATOM
        212
             NH1
                 ARG
                         24
                                  4.089 -33.525 -12.583
                                                          1.00
                                                                0.00
             NH2 ARG
                         24
                                  6.009 -32.623 -13.540
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        213
ATOM
             C
                 ARG
                         24
                                  3.691 -31.825 -9.446
                                                          1.00
                                                                0.00
        214
             0
                 ARG
                         24
                                  2.960 -32.336 -10.297
ATOM
        215
                                                          1.00
                                                                0.00
        216
                                  4.586 - 32.530
                                                                0.00
ATOM
             N
                 LYS
                         25
                                                 -8.748
                                                          1.00
        217 CA
                 LYS
                         25
                                  4.845 -33.956 -8.898
                                                                0.00
ATOM
                                                          1.00
                 LYS
                         25
                                  5.943 -34.410 -7.919
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        218
             CB
             CG
                 LYS
                         25
                                  7.327 -33.811 -8.234
                                                                0.00
        219
                                                          1.00
ATOM
ATOM
             CD
                 LYS
                         25
                                  8.407 -34.890
                                                 -8.405
                                                          1.00
                                                                0.00
        220
                                  8.719 -35.591 -7.075
ATOM
        221
             CE
                 LYS
                         25
                                                          1.00
                                                                0.00
        222
             NZ
                 LYS
                         25
                                  9.766 -36.619 -7.225
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        223
             C
                 LYS
                         25
                                  3.616 -34.849 -8.740
                                                                0.00
ATOM
                                                          1.00
ATOM
        224
             0
                 LYS
                         25
                                  3.282 -35.591
                                                 -9.663
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        225
             N
                 TYR
                         26
                                  2.983 -34.815
                                                 -7.566
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                  1.861 -35.687 -7.237
ATOM
        226
             CA
                 TYR
                         26
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CB
                 TYR
ATOM
        227-
                         26
                                  1.923 -36.027 -5.739
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             CG
                 TYR
                                  3.345 -36.226
                                                  -5.235
                                                                 0.00
        228
                         26
                                                          1.00
ATOM
        229
             CD1 TYR.
                         26
                                   4.221 -37.098
                                                 -5.908
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        230
              CE1 TYR
                                   5.542 -37.257 -5.461
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         26
              CZ TYR
ATOM
        231
                         26
                                  5.994 -36.549
                                                 -4.333
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        232
              OH TYR
                         26
                                  7.281 -36.703 -3.906
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CE2 TYR
                                  5.122 -35.682
                                                  -3.655
        233
                         26
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CD2 TYR
                                   3.800 - 35.522
                                                  -4.106
                                                          1.00
                                                                 0.00
        234
                         26
ATOM
        235
             С
                  TYR
                                   0.518 -35.091
                                                  -7.647
                                                          1.00
                         26
                                                                 0.00
ATOM
         236
             0
                  TYR
                         26
                                  -0.364 -35.826
                                                  -8.088
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                  -7.501
ATOM
         237
             N
                  GLY
                         27
                                  0.371 - 33.771
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         238
              CA
                  GLY
                         27
                                  -0.845 -33.042
                                                  -7.826
                                                          1.00
                                                                 0.00
              C
                  GLY
                                  -1:284 -32.213
ATOM
         239
                         27
                                                  -6.621
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         240
              0
                  GLY:
                         27
                                  -0.904 -32.504
                                                  -5.486
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  GLU
ATOM
              N
                                  -2.091 -31.177
                                                  -6.866
                                                          1.00
                                                                 0.00
         241
                         28
ATOM
         242
              CA
                  GLU
                         28
                                  -2.603 -30.327
                                                  -5.802
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CB
                  GLU-
ATOM
         243
                          28
                                  -3.093 -28.993
                                                  -6.387
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CG
                  GLU
                          28
                                  -3.132 -27.890
                                                  -5.318
                                                                 0.00
ATOM
         244
                                                          1.00
ATOM
              CD
                  GLU
                                  -3.327 - 26.504
                                                  -5.925
                                                          1.00
                                                                 0.00
         245
                          28
              OE1 GLU
ATOM
         246
                          28
                                  -2.452 -26.100
                                                  -6.724
                                                          1.00
                                                                 0.00
              OE2 GLU
                                                  -5.546
ATOM
         247
                          28
                                  -4.314 -25.839
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         248
             C
                  GLU
                          28
                                  -3.697 -31.101
                                                  -5.061
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         249
              0
                  GLU
                          28
                                  -4.330 -31.989
                                                  -5.634
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                  -3.910 -30.785
ATOM
         250
              N
                  GLY
                          29
                                                  -3.783
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         251
              CA
                  GLY
                                  -4.904 -31.468
                                                  -2.972
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  GLY
                                                  -2.634
ATOM
         252
              C
                          29
                                  -4.471 -32.893
                                                          1.00
                                                                 0.00
         253
              0
                  GLY
                          29
                                  -5.292 -33.806
                                                  -2.626
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                  ASN
                                  -3.176 -33.079
                                                  -2.348
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         254
              N
                          30
ATOM
         255
              CA
                  ASN
                          30
                                  -2.558 -34.348
                                                  -1.980
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CB
                  ASN
                                  -1.776 -34.938
                                                  -3.170
                                                                 0.00
ATOM
         256
                          30
                                                          1.00
ATOM
         257
              CG ASN
                          30
                                  -2.590 -35.293
                                                  -4.416
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         258
              OD1 ASN
                          30
                                  -2.027 -35.389
                                                  -5.503
                                                          1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         259
              ND2 ASN
                          30
                                  -3.895 -35.528
                                                  -4.291
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         260
              C
                  ASN
                          30
                                  -1.613 -34.049 -0.815 1.00 0.00
```

```
81
                                                                   82
ATOM
        261
             0
                 ASN
                         30
                                 -0.504 -34.570 -0.749 1.00 0.00
                 TRP
ATOM
        262
             N
                         31
                                  -2.056 -33.180
                                                   0.095
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        263
             CA
                 TRP
                         31
                                  -1.329 -32.701
                                                   1.262 1.00
                                                                 0.00
                 TRP
ATOM
        264
             CB
                         31
                                  -2.269 -31.812
                                                   2.081
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        265
             CG
                 TRP
                         31
                                  -3.023 -30.838
                                                   1.233 1.00
                                                                 0.00
             CD1 TRP
                                  -4.367 -30.716
ATOM
        266
                         31
                                                   1.172 1.00
                                                                 0.00
             NE1 TRP
                                  -4.701 -29.740
                                                   0.256
ATOM
        267
                         31
                                                           1.00
                                                                 0.00
             CE2 TRP
ATOM
        268
                         31
                                  -3.578 -29.185
                                                  -0.317
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CZ2 TRP
ATOM
        269
                         31
                                  -3.395 -28.190
                                                  -1.287
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        270
             CH2 TRP
                         31
                                  -2.090 -27.851
                                                  -1.671
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CZ3 TRP
ATOM
        271
                         31
                                  -0.990 -28.498
                                                  -1.091
                                                           1.00
                                                                 0.00
             CE3 TRP
                                                                 0.00
ATOM
        272
                         31
                                  -1.187 - 29.496
                                                   -0.123
                                                          1.00
ATOM
        273
             CD2 TRP
                         31
                                  -2.485 -29.866
                                                   0.290
                                                          1.00
                                                                 0.00
        274 C
                  TRP
                                  -0.740 -33.832
ATOM
                         31
                                                    2.092 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        275
             0
                  TRP
                         31
                                   0.415 - 33.764
                                                    2.503
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        276 N
                  SER
                         32
                                  -1.527 -34.877
                                                    2.330
                                                          1.00
                                                                 0.00
        277
             CA
                  SER
                         32
                                  -1.082 -36.032
                                                    3.100 1.00
ATOM
                                                                 0.00
                  SER
        278
             CB
                         32
                                  -2.264 -36.982
                                                    3.320 1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
        279
              0G
                  SER
                         32
                                  -3.016 -37.167
                                                    2.132
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        280
             C
                  SER
                                   0.109 -36.724
                         32
                                                    2.425
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        281
             0
                  SER
                         32
                                   1.066 -37.120
                                                    3.089
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        282
             N
                  LYS
                         33
                                   0.050 - 36.863
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                    1.098
ATOM
        283
             CA
                 LYS
                         33
                                   1.086 -37.498
                                                    0.298
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CB
                  LYS
ATOM
        284
                         33
                                   0.616 - 37.725
                                                   -1.152 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        285
              CG
                 LYS
                         33
                                  -0.573 -38.689
                                                   -1.342 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        286
              CD
                 LYS
                         33
                                  -1.854 -38.224
                                                   -0.635
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        287
              CE
                 LYS
                         33
                                  -3.119 -38.957
                                                   -1.082
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        288
              NZ
                  LYS
                         33
                                  -4.290 -38.484
                                                   -0.314
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         289
              С
                  LYS
                         33
                                   2.333 -36.614
                                                    0.335
                                                           1.00
                                                                 0.00
              0
                  LYS
ATOM
         290
                         33
                                   3.422 - 37.088
                                                    0.652
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         291
              N
                  ILE
                         34
                                   2.163 -35.326
                                                    0.022
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CA
                  ILE
                                   3.228 -34.333
         292
                         34
                                                    0.016
                                                           1.00
                                                                  0.00
              CB
                  ILE
ATOM
         293
                         34
                                   2.656 - 32.946
                                                   -0.339
                                                           1.00
                                                                  0.00
              CG2 ILE
ATOM
         294
                                   3.731 -31.864
                                                   -0.160
                                                           1.00
                                                                  0.00
                         34
         295
              CG1 ILE
                                   2.167 -32.957
                                                                  0.00
ATOM
                          34
                                                   -1.800
                                                          1.00
              CD1 ILE
                                   1.282 -31.768
ATOM
         296
                                                   -2.177
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          34
ATOM
              С
                  ILE
                                   3.951 -34.355
                                                           1.00
                                                                  0.00
         297
                         34
                                                    1.363
ATOM
         298
              0
                  ILE
                                   5.176 -34.399
                                                    1.391
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          34
              N
                  LEU
                                   3.198 -34.343
ATOM
         299
                          35
                                                    2.467
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         300
              CA
                 LEU
                          35
                                   3.733 -34.388
                                                    3.820
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              CB
                  LEU
                                   2.577 -34.247
                                                           1.00
                                                                  0.00
         301
                          35
                                                    4.820
ATOM
         302
              CG LEU
                          35
                                   2.991 -34.350
                                                    6.298
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                   3.968 -33.239
         303
              CD1 LEU
ATOM
                          35
                                                    6.706 1.00
                                                                  0.00
ATOM
         304
              CD2 LEU
                          35
                                   1.730 -34.280
                                                    7.166
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         305
              C
                  LEU
                          35
                                   4.513 -35.687
                                                    4.044
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              0
                  LEU
                          35
                                   5.592 -35.662
                                                           1.00
                                                                  0.00
         306
                                                    4.633
ATOM
         307
              N
                  LEU
                                   3.978 -36.826
                          36
                                                    3.585
                                                           1.00
                                                                  0.00
              \mathsf{C}\mathsf{A}
                  LEU
ATOM
         308
                          36
                                   4.631 -38.119
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                                    3.746
ATOM
              CB
                  LEU
                                   3.697 -39.237
         309
                          36
                                                    3.251
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         310 CG LEU
                          36
                                   4.242 -40.660
                                                    3.476 1.00 0.00
```

83 84 ATOM 311 CD1 LEU 3.660 1.00 0.00 36 3.065 -41.628 312 CD2 LEU 1.00 0.00 ATOM 36 5.087 -41.160 2.295 313 C LEU ATOM 36 5.993 -38.126 3.052 1.00 0.00 ATOM 314 0 LEU 36 6.997 -38.486 3.667 1.00 0.00 315 N ATOM HIS 37 6.026 -37.731 1.00 1.775 0.00 ATOM 316 CA HIS 37 7.244 - 37.6890.978 1.00 0.00 317 CB HIS **ATOM** 37 6.894 -37.375 -0.4831.00 0.00 ATOM 318 CG HIS 37 6.037 - 38.428-1.1411.00 0.00 ATOM ND1 HIS 37 6.457 - 39.739-1.2971.00 0.00 319 ATOM 320 CE1 HIS 37 5.467 -40.406 -1.9141.00 0.00 ATOM NE2 HIS 321 37 4.413 -39.634 -2.1831.00 0.00 ATOM 322 CD2 HIS 37 4.779 -38.384 -1.6921.00 0.00 **ATOM** 323 C HIS 37 8.226 -36.659 0.00 1.539 1.00 ATOM 324 0 HIS 37 9.369 -36.991 1.848 1.00 0.00 N TYR ATOM 325 38 7.770 - 35.4111.661 1.00 0.00 ATOM 326 CA TYR 38 8.529 -34.282 2.161 1.00 0.00 ATOM 327 CB TYR 38 8.345 -33.090 1.221 1.00 0.00 ATOM 328 CG TYR 38 8.804 -33.240 -0.2201.00 0.00 ATOM CD1 TYR 7.893 -33.018 329 38 -1.2711.00 0.00 ATOM 330 CE1 TYR 38 8.315 -33.120 -2.6081.00 0.00 **ATOM** 331 CZ TYR 9.648 - 33.443-2.90338 1.00 0.00 ATOM 332 0H TYR 38 10.055 -33.526 -4.2031.00 0.00 CE2 TYR **ATOM** 333 38 10.559 -33.675 -1.857 1.00 0.00 ATOM 334 CD2 TYR 38 10.139 -33.572 -0.5191.00 0.00 C TYR **ATOM** 335 38 8.034 -33.923 3.563 1.00 0.00 ATOM 336 0 TYR 38 7.074 - 33.1723.719 1.00 0.00 ATOM N LYS 337 39 8.696 -34.462 4.588 1.00 0.00 ATOM 338  $\mathsf{CA}$ LYS 39 8.345 -34.225 5.980 1.00 0.00 CB LYS ATOM 339 39 8.977 -35.322 6.843 1.00 0.00 ATOM 340 CG LYS 39 8.383 -36.687 6.457 1.00 0.00 CDATOM 341 LYS 8.975 -37.820 7.298 1.00 0.00 39 ATOM 342 CE LYS 8.376 -39.154 39 6.836 1.00 0.00 ATOM 343 NZ LYS 39 8.907 -40.293 7.608 1.00 0.00 C ATOM 344 LYS 39 8.777 -32.819 6.409 1.00 0.00 0 LYS 9.949 -32.467 ATOM 345 39 6.285 1.00 0.00 ATOM 346 N PHE 7.821 -32.022 6.903 1.00 0.00 40 ATOM 347 CA PHE 40 8.017 -30.646 7.351 1.00 0.00 PHE ATOM 348 CB 40 6.885 - 29.7826.776 1.00 0.00 ATOM 349 CG PHE 40 6.731 -29.758 5.266 1.00 0.00 ATOM CD1 PHE 5.479 -29.451 350 40 4.700 1.00 0.00 ATOM 351 CE1 PHE 40 5.322 -29.416 3.305 1.00 0.00 CZ PHE ATOM 352 40 6.411 -29.691 1.00 0.00 2.467 **ATOM** 353 CE2 PHE 40 7.659 - 29.9983.031 1.00 0.00 ATOM 354 CD2 PHE 40 7.823 -30.029 4.421 1.00 0.00 ATOM 355 C PHE 40 8.043 -30.560 8.881 1.00 0.00 0 PHE ATOM 356 40 7.864 -31.565 9.568 1.00 0.00 ATOM N ASN 8.263 -29.351 357 41 9.414 1.00 0.00 ATOM 358 CAASN 8.334 -29.087 10.848 1.00 0.00 41 ATOM ASN 359 CB 41 9.060 - 27.75811.114 1.00 0.00ATOM 360 CG ASN 41 10.518 -27.788 10.662 1.00 0.00

	85				, ,			86
ATOM	361	0D1	ASN	41	11.407 -28.099	11.450	1.00	0.00
ATOM	362	ND2		41	10.772 -27.456	9.398	1.00	0.00
ATOM	363	C	ASN	41	6.942 -29.092	11.485	1.00	0.00
ATOM	364	0	ASN	41	6.445 -28.051	11.911	1.00	0.00
ATOM	365	N	ASN	42	6.324 -30.277	11.554	1.00	0.00
				42	5.009 -30.517		1.00	0.00
ATOM	366	CA	ASN			12.138		
ATOM	367	CB	ASN	42	5.064 -30.327	13.664	1.00	0.00
ATOM	368	CG	ASN	42	3.854 -30.939	14.368	1.00	0.00
ATOM	369		ASN	42	3.961 -31.998	14.980	1.00	0.00
ATOM	370		ASN	42	2.697 -30.282	14.292	1.00	0.00
ATOM	371	C	ASN	42	3.925 -29.676	11.457	1.00	0.00
ATOM	372	0	ASN	42	3.353 -28.768	12.059	1.00	0.00
ATOM	373	N	ARG	43	3.644 -29.993	10.190	1.00	0.00
ATOM	374	CA	ARG	43	2.639 -29.332	9.372	1.00	0.00
ATOM	375	CB	ARG	43	3.237 -28.929	8.022	1.00	0.00
ATOM	376	CG	ARG	43	3.981 -27.595	8.006	1.00	0.00
ATOM	377	CD	ARG	43	5.068 -27.458	9.060	1.00	0.00
ATOM	378	NE	ARG	43	5.867 -26.256	8.789	1.00	0.00
ATOM	379	CZ	ARG	43	5.530 -25.007	9.152	1.00	0.00
ATOM	380		ARG	43	4.407 -24.790	9.849	1.00	0.00
ATOM	381	NH2	ARG	43	6.321 -23.989	8.805	1.00	0.00
ATOM	382	C	ARG	43	1.501 -30.313	9.111	1.00	0.00
ATOM	383	0	ARG	43	1.729 -31.402	8.590	1.00	0.00
ATOM	384	N	THR	44	0.282 -29.907	9.455	1.00	0.00
ATOM	385	CA	THR	44	-0.932 -30.678	9.242	1.00	0.00
ATOM	386	CB	THR	44	-2.027 -30.134	10.171	1.00	0.00
ATOM	387	CG2	THR	44	-1.608 -30.198	11.644	1.00	0.00
ATOM	388	0G1	THR	44	-2.313 -28.793	9.817	1.00	0.00
ATOM	389	C	THR	44	-1.385 -30.526	7.785	1.00	0.00
ATOM	390	0	THR	44	-0.929 -29.626	7.080	1.00	0.00
ATOM	391	N	SER	45	-2.315 -31.379	7.337	1.00	0.00
ATOM	392	CA	SER	45	-2.884 -31.308	5.992	1.00	0.00
ATOM	393	CB	SER	45	-4.032 -32.322	5.888	1.00	0.00
ATOM	394	0G	SER	45	-4.657 -32.243	4.625	1.00	0.00
ATOM	395	C	SER	45	-3.367 -29.872	5.726	1.00	0.00
ATOM	396	0	SER	45	-3.120 -29.299	4.663	1.00	0.00
ATOM	397	N	VAL	46	-4.032 -29.292	6.734	1.00	0.00
ATOM	398	CA	VAL	46	-4.540 -27.930	6.725	1.00	0.00
ATOM	399	CB	VAL	46	-5.271 -27.647	8.051	1.00	0.00
ATOM	400		VAL	46	-5.751 -26.196	8.126	1.00	0.00
ATOM	401	CG2	2 VAL	46	-6.489 -28.563	8.228	1.00	0.00
ATOM	402	C	VAL	. 46	-3.384 -26.952	6.487	1.00	0.00
ATOM	403	0	VAL	46	-3.485 -26.108	5.603	1.00	0.00
ATOM	404	N	MET	47	-2.296 -27.068	7.263	1.00	0.00
ATOM	405	CA	MET	47	-1.121 -26.205	7.147	1.00	0.00
ATOM	406	CB	MET	47	0.000 -26.689	8.089	1.00	0.00
ATOM	407	CG	MET	47	0.384 -25.728	9.222	1.00	0.00
ATOM	408	SD	MET	47	-0.520 -25.895	10.787	1.00	0.00
ATOM	409	CE	MET	47	-2.194 -25.429	10.294	1.00	0.00
ATOM	410	C	MET	47	-0.610 -26.170	5.705	1.00	0.00

	87							88	
ATOM	411	0	MET	47	-0.407 -25.093	5.147	1.00	0.00	
ATOM	412	N	LEU	48	-0.396 -27.345	5.095	1.00	0.00	
ATOM	413	CA	LEU	48	0.090 -27.410	3.719	1.00	0.00	
ATOM	414	CB	LEU	48	0.269 -28.854	3.235	1.00	0.00	
ATOM	415	CG	LEU	48	1.537 -29.544	3.756	1.00	0.00	
ATOM	416	CD1	LEU	48	1.318 -30.188	5.119	1.00	0.00	
ATOM	417		LEU	48	1.988 -30.628	2.779	1.00	0.00	
ATOM	418	С	LEU	48	-0.875 -26.684	2.784	1.00	0.00	
ATOM	419	0	LEU	48	-0.453 -25.854	1.978	1.00	0.00	
ATOM	420	N	LYS	49	-2.169 -27.005	2.899	1.00	0.00	
ATOM	421	CA	LYS	49	-3.211 -26.403	2.089	1.00	0.00	
ATOM	422	СВ	LYS	49	-4.575 -26.943	2.537	1.00	0.00	
ATOM	423	CG	LYS	49	-5.743 -26.327	1.756	1.00	0.00	
ATOM	424	CD	LYS	49	-7.037 -26.388	2.572	1.00	0.00	
ATOM	425	CE	LYS	49	-7.087 -25.398	3.746	1.00	0.00	
ATOM	426	NZ	LYS	49	-8.435 -25.353	4.344	1.00	0.00	
ATOM	427	C	LYS	49	-3.167 -24.878	2.181	1.00	0.00	
ATOM	428	0	LYS	49	-2.911 -24.212	1.179	1.00	0.00	
ATOM	429	N	ASP	50	-3.439 -24.320	3.366	1.00	0.00	
ATOM	430	CA	ASP	50	-3.470 -22.879	3.558	1.00	0.00	
ATOM	431	CB	ASP	50	-3.982 -22.485	4.951	1.00	0.00	
ATOM	432	CG	ASP	50	-3.120 -22.961	6.115	1.00	0.00	
ATOM	433		ASP	50	-1.910 -22.664	6.097	1.00	0.00	
ATOM	434		ASP	50	-3.707 -23.569	7.037	1.00	0.00	
ATOM	435	C	ASP	50	-2.166 -22.206	3.125	1.00	0.00	
ATOM	436	0	ASP	50	-2.222 -21.148	2.500	1.00	0.00	
ATOM	437	N	ARG	51	-1.005 -22.812	3.410	1.00	0.00	
ATOM	438	CA	ARG	51	0.271 -22.253	2.989	1.00	0.00	
ATOM	439	CB	ARG	51	1.449 -23.110	3.470	1.00	0.00	
ATOM	440	CG	ARG	51	2.803 -22.607	2.934	1.00	0.00	
ATOM	441	CD	ARG	51	3.151 -21.203	3.444	1.00	0.00	
ATOM	442	NE	ARG	51	4.491 -20.786	3.000	1.00	0.00	
ATOM	443	CZ	ARG	51	4.904 -19.516	2.844	1.00	0.00	
ATOM	444		ARG	51	6.121 -19.257	2.353	1.00	0.00	
ATOM	445		ARG	51	4.114 -18.493	3.185	1.00	0.00	
ATOM	446	C	ARG	51	0.286 -22.118	1.468	1.00	0.00	
ATOM	447	0	ARG	51	0.631 -21.055	0.953	1.00	0.00	
ATOM	448	N	TRP	52	-0.086 -23.185	0.747	1.00	0.00	
ATOM	449	CA	TRP	52	-0.102 -23.144	-0.700	1.00	0.00	
ATOM	450	СВ	TRP	52	-0.362 -24.524	-1.297	1.00	0.00	
ATOM	451	CG	TRP	52	-0.264 -24.541	-2.790	1.00	0.00	
ATOM	452		TRP	52	-1.260 -24.877	-3.635	1.00	0.00	
ATOM	453		TRP	52	-0.825 -24.784	-4.938	1.00	0.00	
ATOM	454		TRP	52	0.486 -24.362	-5.001	1.00	0.00	
ATOM	455		TRP	52	1.361 -24.110	-6.067	1.00	0.00	
ATOM	456		TRP	52	2.666 -23.675	-5.792	1.00	0.00	
ATOM	457		TRP	52	3.078 -23.505	-4.460	1.00	0.00	
ATOM	458		TRP	52	2.196 -23.765	-3.397	1.00	0.00	
ATOM	459		2 TRP	52	0.875 -24.200	-3.637	1.00	0.00	
ATOM	460	С	TRP	52	-1.108 -22.115	-1.207	1.00	0.00	
				_					

```
89
                                                                   90
ATOM
        461
            0
                 TRP
                         52
                                 -0.815 -21.428 -2.181 1.00 0.00
                                 -2.276 -21.984
                                                  -0.566
                                                                0.00
ATOM
        462
             N
                  ARG
                         53
                                                          1.00
ATOM
        463
            CA
                 ARG
                         53
                                 -3.254 - 20.990
                                                  -0.990
                                                          1.00
                                                                 0.00
            CB
                 ARG
                         53
                                 -4.563 -21.091
                                                  -0.194
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        464
        465
             CG
                  ARG
                         53
                                 -5.310 -22.403
                                                  -0.484
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
ATOM
        466
             CD
                  ARG
                         53
                                 -6.755 - 22.388
                                                   0.031
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        467
             NE
                  ARG
                         53
                                  -6.838 -22.048
                                                   1.459
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CZ
                  ARG
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        468
                         53
                                 -7.980 - 21.751
                                                   2.103
             NH1
                                  -9.160 -21.876
                                                   1.486
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        469
                 ARG
                         53
                                  -7.937 -21.323
                                                   3.373
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        470
             NH2 ARG
                         53
             C
                                  -2.629 -19.595
                                                  -0.885
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        471
                  ARG
                         53
        472 0
                  ARG
                                  -2.676 -18.837
                                                  -1.852
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         53
        473
             N
                  THR
                                  -2.029 -19.266
                                                   0.268
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         54
                                  -1.373 -17.982
                                                                 0.00
         474 CA
                 THR
                         54
                                                   0.484
                                                          1.00
ATOM
              CB
                  THR
                                  -0.752 -17.919
                                                   1.893
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         475
                         54
              CG2 THR
                                                          1.00
                                                                 0.00
         476
                         54
                                  -0.036 - 16.585
                                                   2.135
ATOM
              OG1 THR
                                                   2.878
                                                          1.00
                                                                 0.00
         477
                                  -1.754 - 18.064
ATOM
                         54
                                                  -0.588
                                                                 0.00
         478
              С
                  THR
                         54
                                  -0.307 -17.747
                                                          1.00
ATOM
                  THR
                                  -0.367 -16.752
                                                  -1.306
                                                           1.00
                                                                 0.00
         479
              0
ATOM
                         54
         480
              N
                  MET
                                   0.668 - 18.659
                                                  -0.689
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         55
                  MET
                                                  -1.639
                                                           1.00
                                                                 0.00
         481
              CA
                         55
                                   1.765 -18.559
ATOM
                                   2.714 -19.757
                                                  -1.463
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         482
              CB
                  MET
                         55
              CG · MET
                                   3.966 -19.675
                                                  -2.352
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         483
                         55
                                   3.728 -20.158 -4.087
                                                           1.00
                                                                 0.00
              SD
                  MET
                         55
ATOM
         484
                                   4.249 -18.650 -4.944
ATOM
         485
              CE
                  MET
                         55
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C
                  MET
                         55
                                   1.259 -18.412
                                                  -3.073
                                                          1.00
                                                                 0.00
         486
ATOM
              0
                  MET
                                   1.555 -17.409
                                                  -3.721
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         487
                          55
ATOM
         488
              N
                  LYS
                          56
                                   0.512 - 19.405
                                                  -3.576
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         489
              CA
                  LYS
                                   0.017 -19.384
                                                  -4.944
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          56
                  LYS
                                  -0.770 -20.657
                                                  -5.314
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         490
              CB
                          56
ATOM
         491
              CG
                 LYS
                          56
                                  -2.289 -20.579
                                                  -5.111
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CD
                  LYS
                                  -2.975 -21.937
                                                  -5.321
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         492
                          56
ATOM
         493
              CE
                  LYS
                          56
                                  -2.652 -22.647
                                                   -6.647
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                                   -7.842
ATOM
              NZ
                  LYS
                          56
                                  -3.091 -21.901
                                                           1.00
                                                                  0.00
         494
ATOM
         495
              C
                  LYS
                          56
                                  -0.711 -18.077
                                                   -5.240
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                                                 0.00
 ATOM
         496
              0
                  LYS
                          56
                                  -0.475 - 17.490
                                                   -6.286
                                                           1.00
                                                  -4.322
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         497
              N
                  LYS
                          57
                                  -1.565 -17.611
                  LYS
                                  -2.293 - 16.359
                                                  -4.478
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         498
              CA
                          57
              CB
                  LYS
                          57
                                  -3.289 -16.207
                                                  -3.319
                                                          1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         499
              CG
                                  -4.136 -14.933
                                                  -3.425
                                                           1.00
                                                                  0.00
         500
                  LYS
                          57
 ATOM
              CD
                  LYS
                                  -5.087 -14.848
                                                   -2.225
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         501
                          57
              CE
                  LYS
                                  -5.902 -13.550
                                                  -2.270
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         502
                          57
                                                  -1.096
              NZ
                  LYS
                          57
                                  -6.787 -13.422
                                                          1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         503
                                  -1.336 -15.161
                                                   -4.550
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         504
              C
                   LYS
                          57
                   LYS
                                   -1.514 -14.297
                                                   -5.405
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         505
              0
                          57
              N
                   LEU
                          58
                                   -0.343 - 15.101
                                                   -3.651
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         506
 ATOM
              CA LEU
                          58
                                   0.630 -14.015
                                                   -3.562
                                                           1.00
                                                                  0.00
         507
 ATOM
         508
              CB
                  LEU
                          58
                                   1.603 -14.289
                                                   -2.400
                                                           1.00
                                                                  0.00
              CG
                                    2.548 -13.142
                                                   -1.990
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         509
                  LEU
                          58
 ATOM
         510 CD1 LEU
                          58
                                    3.655 -12.854 -3.011 1.00 0.00
```

```
91
                                                                 92
        511 CD2 LEU
ATOM
                        58
                                 1.794 -11.855 -1.637 1.00 0.00
ATOM
        512
            C
                 LEU
                        58
                                 1.333 -13.790 -4.903 1.00
                                                             0.00
ATOM
        513 0
                 LEU
                        58
                                 1.195 -12.719 -5.491 1.00
                                                              0.00
ATOM
        514 N
                 LYS
                        59
                                 2.082 -14.785 -5.396 1.00
                                                              0.00
ATOM
        515 CA LYS
                        59
                                 2.775 -14.664 -6.679
                                                        1.00 0.00
ATOM
        516 CB
                 LYS
                        59
                                 3.710 -15.862 -6.896
                                                        1.00
                                                              0.00
ATOM
        517 CG
                 LYS
                        59
                                 4.342 -15.856
                                                -8.301 1.00
                                                              0.00
ATOM
        518 CD
                 LYS
                        59
                                 5.279 -17.048 -8.526
                                                        1.00
                                                              0.00
ATOM
        519 CE
                LYS
                        59
                                 6.733 -16.758 -8.143 1.00
                                                              0.00
ATOM
        520 NZ
                 LYS
                        59
                                 7.544 -17.978
                                                -8.296
                                                        1.00
                                                              0.00
ATOM
        521 C
                 LYS
                        59
                                 1.752 -14.579 -7.813 1.00
                                                              0.00
ATOM
        522 0
                 LYS
                        59
                                 1.916 -13.791 -8.740 1.00
                                                               0.00
ATOM
        523 N
                 LEU
                        60
                                 0.719 -15.420 -7.714 1.00
                                                              0.00
ATOM
        524 CA LEU
                        60
                                -0.402 -15.599 -8.620
                                                        1.00
                                                               0.00
                 LEU
ATOM
        525 CB
                        60
                                -0.854 -14.294 -9.300 1.00
                                                               0.00
ATOM
        526
            CG LEU
                        60
                                -2.285 -14.360 -9.866
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        527
             CD1 LEU
                         60
                                -3.347 -14.436 -8.760
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        528
             CD2 LEU
                         60
                                -2.543 -13.107 -10.713
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        529
             C
                 LEU
                                -0.142 -16.769 -9.573
                         60
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        530
             0
                 LEU
                         60
                                -0.245 -16.636 -10.791
                                                        1.00
                                                               0.00
        531 N
                 ILE
                                 0.178 -17.931 -8.993 1.00
ATOM
                         61
                                                              0.00
ATOM
        532 CA
                 ILE
                         61
                                 0.414 - 19.173 - 9.714
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        533
             CB
                 ILE
                                 1.238 -20.150 -8.846
                                                         1.00
                                                               0.00
                         61
ATOM
        534
             CG2 ILE
                                  1.113 -21.610 -9.319
                                                         1.00
                                                               0.00
             CG1 ILE
ATOM
        535
                         61
                                 2.707 -19.706 -8.803
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        536
             CD1 ILE
                         61
                                 3.575 -20.628 -7.940
                                                         1.00
                                                               0.00
             C
ATOM
        537
                 ILE
                         61
                                 -0.955 -19.766 -10.031
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        538 0
                 ILE
                         61
                                -1.801 -19.868 -9.139
                                                         1.00
                                                               0.00
        539
             N
                 SER
ATOM
                         62
                                 -1.164 -20.185 -11.282
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        540
             CA
                 SER
                         62
                                -2.395 -20.827 -11.705
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
             CB
                 SER
        541
                         62
                                 -2.690 -20.485 -13.174
                                                         1.00
                                                               0.00
        542 OG
                 SER
ATOM
                         62
                                -1.569 -20.732 -14.000
                                                         1.00
                                                               0.00
        543
             C
                 SER
ATOM
                         62
                                 -2.182 -22.317 -11.447
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        544
             0
                 SER
                         62
                                -2.679 -22.852 -10.455
                                                        1.00
                                                              0.00
        545
ATOM
             N
                 SER
                         63
                                -1.408 -22.945 -12.336
                                                        1.00
                                                               0.00
                 SER
                                                        1.00
ATOM
        546
             CA
                         63
                                -1.010 -24.346 -12.311
                                                               0.00
ATOM
        547
             CB
                 SER
                                 -1.732 -25.097 -13.434
                         63
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        548
             OG.
                 SER
                         63
                                 -3.130 -24.912 -13.328
                                                        1.00 0.00
ATOM
        549
             C
                  SER
                         63
                                  0.513 -24.481 -12.465
                                                         1.00
                                                               0.00
                  SER
ATOM
        550 \cdot 0
                         63
                                  1.031 -25.596 -12.431
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        551 N
                  ASP
                         64
                                  1.228 -23.359 -12.633
                                                         1.00
                                                               0.00
                 ASP
ATOM
        552
             CA
                         64
                                  2.673 -23.272 -12.793
                                                         1.00
                                                               0.00
             CB
                 ASP
                                                               0.00
ATOM
        553
                         64
                                  3.019 -21.948 -13.503
                                                         1.00
             CG
ATOM
        554
                 ASP
                                  2.433 -20.701 -12.836
                                                         1.00
                                                               0.00
                         64
ATOM
        555
             OD1 ASP
                         64
                                  3.225 -19.792 -12.510
                                                         1.00
                                                               0.00
             OD2 ASP
ATOM
        556
                                  1.188 -20.658 -12.692
                                                         1.00
                                                               0.00
                         64
ATOM
             С
                  ASP
                                  3.354 -23.423 -11.428
                                                         1.00
                                                               0.00
        557
                         64
ATOM
         558
             0
                  ASP
                                  4.029 -22.520 -10.941
                                                         1.00
                                                               0.00
                         64
ATOM
             N
                  SER
                                  3.151 -24.584 -10.799
                                                               0.00
         559
                         65
                                                         1.00
ATOM
         560 CA
                 SER
                                  3.660 -24.926 -9.479 1.00 0.00
```

```
93
                                                                   94
ATOM
        561 CB
                                  2.889 -26.151 -8.974 1.00 0.00
                 SER
                         65
                 SER
                                                                0.00
        562
            0G
                         65
                                  1.501 -25.902 -9.082
                                                         1.00
ATOM
             C
                 SER
                                  5.176 -25.148
                                                 -9.405
                                                          1.00
ATOM
        563
                         65
                                                                0.00
                 SER
                                                                0.00
        564
            0
                         65
                                  5.683 -25.449 -8.325
                                                          1.00
ATOM
ATOM
        565
             N
                 GLU
                         66
                                  5.910 -25.007 -10.515
                                                         1.00
                                                                0.00
             CA
                 GLU
                                  7.354 -25.185 -10.562
                                                                0.00
        566
                         66
                                                         1.00
ATOM
ATOM
        567
             CB
                 GLU
                         66
                                  7.871 -25.011 -12.000
                                                          1.00
                                                                0.00
            CG
                 GLU
                                  7.482 -26.169 -12.937
                                                                0.00
        568
                         66
                                                         1.00
ATOM
        569
             CD
                 GLU
                         66
                                  6.002 -26.211 -13.318
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        570
             OE1 GLU
                         66
                                  5.563 -27.302 -13.738
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
ATOM
             OE2 GLU
                                  5.336 -25.162 -13.182
                                                          1.00
                                                                0.00
        571
                         66
            C
                 GLU
                                  8.052 -24.203 -9.614
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        572
                         66
        573
             0
                 GLU
                                  8.834 -24.628 -8.762
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
                         66
        574 N
                 ASP
                                  7.769 -22.900 -9.764
                         67
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
ATOM
             CA
                 ASP
                                  8.336 -21.847
                                                  -8.933
                                                          1.00
                                                                0.00
        575
                         67
                 ASP
                                  9.490 -21.119
                                                 -9.646
                                                                0.00
        576
             CB
                         67
                                                          1.00
ATOM
             CG
                 ASP
                                 10.158 -20.070
                                                 -8.753
                                                                0.00
ATOM
        577
                         67
                                                          1.00
             OD1 ASP
                                  9.915 -18.865
                                                  -8.987
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        578
                         67
                                                                0.00
ATOM
        579
             OD2 ASP
                                  10.903 -20.479
                                                  -7.835
                                                          1.00
                         67
             C
                 ASP
                                  7.230 -20.893
                                                  -8.498
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        580
                         67
ATOM
        581
             OT1 ASP
                         67
                                  7.289 -20.492
                                                  -7.311
                                                          1.00
                                                                0.00
             OT2 ASP
                                  6.704 -20.228
                                                  -9.417
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        582
                         67
ATOM
        583
             05'
                 GUA
                         68
                                 -6.576 -39.100
                                                  11.299
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             C5'
                 GUA
                                  -6.212 -39.919
                                                  10.207
                                                          1.00
                                                                 0.00
        584
                         68
             C4'
                 GUA
                                 -6.610 -39.269
                                                   8.877
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        585
                         68
ATOM
        586
             04'
                 GUA
                         68
                                 -7.998 -39.006
                                                   8.822
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                          1.00
ATOM
        587
             C1'
                 GUA
                         68
                                 -8.222 -38.094
                                                   7.767
                                                                 0.00
ATOM
        588
              N9
                  GUA
                                 -9.518 -37.402
                                                   7.945
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         68
ATOM
        589
              68
                  GUA
                         68
                                 -9.995 -36.809
                                                   9.083
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  GUA
                                 -11.187 -36.297
                                                   8.963
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        590
              N7
                         68
ATOM
        591
              C5
                  GUA.
                         68
                                 -11.523 -36.550
                                                   7.638
                                                          1.00
                                                                 0.00
              С6
                  GUA
                                 -12.706 -36.218
                                                   6.910
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         592
                         68
ATOM
         593
              06
                  GUA
                         68
                                 -13.735 -35.692
                                                   7.327
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         594
              N1
                  GUA
                         68
                                 -12.613 -36.562
                                                   5.566
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         595
              C2
                  GUA
                         68
                                 -11.529 -37.191
                                                   4.991
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                           1.00
ATOM
         596
              N2
                  GUA
                         68
                                -11.576 -37.424
                                                   3.677
                                                                 0.00
                  GUA
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         597
              N3
                         68
                                 -10.434 -37.544
                                                   5.680
                  GUA
                                 -10.489 -37.191
                                                   6.994
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         598
              C4
                         68
              C3'
                  GUA
                                  -5.929 -37.916
                                                   8.621
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         599
                         68
              C2'
                  GUA
                                  -7.064 -37.129
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         600
                                                   7.951
                         68
              03'
                  GUA
                                  -4.781 -38.144
                                                   7.811
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         601
                         68
ATOM
         602
              P
                  THY
                                  -3.904 -36.968
                                                   7.119
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         69
              OP1 THY
ATOM
         603
                         69
                                  -3.798 -35.827
                                                   8.055
                                                          1.00
                                                                 0.00
              OP2 THY
                                                                 0.00
ATOM
         604
                         69
                                  -2.679 -37.574
                                                    6.552
                                                          1.00
              05'
                  THY
                                  -4.829 -36.518
                                                    5.881
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         605
                         69
              C5'
                  THY
                                  -5.450 -37.479
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         606
                         69
                                                    5.045
              C4' THY
                                  -6.564 -36.831
                                                    4.222
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         607
                         69
ATOM
         608
              04' THY
                         69
                                  -7.639 -36.299
                                                    4.955
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         609
              C1' THY
                         69
                                  -8.195 -35.221
                                                    4.242
                                                          1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         610 N1
                  THY
                          69
                                  -9.065 -34.453
                                                    5.172 1.00 0.00
```

					(49)			付用乙
	95							96
ATOM	611	C6	THY	69	-8.666 -34.236	6.472	1.00	0.00
ATOM	612	C5	THY	69	-9.498 -33.673	7.383	1.00	0.00
ATOM	613	C7	THY	69	-8.949 -33.445	8.780	1.00	0.00
ATOM	614	C4	THY	69	-10.853 -33.298	7.034	1.00	0.00
ATOM	615	04	THY	69	-11.677 -32.798	7.793	1.00	0.00
ATOM	616	N3	THY	69	-11.179 -33.546	5.713	1.00	0.00
ATOM	617	C2	THY	69	-10.348 -34.100	4.753	1.00	0.00
ATOM	618	02	THY	69	-10.753 -34.256	3.604	1.00	0.00
ATOM	619	C3'	THY	69	-6.055 -35.684	3.337	1.00	0.00
ATOM	620	C2'	THY	69	-6.918 -34.510	3.814	1.00	0.00
ATOM	621	03'	THY	69	-6.223 -36.016	1.969	1.00	0.00
ATOM	622	P	THY	70	-5.460 -35.214	0.794	1.00	0.00
ATOM	623	0P1	THY	70	-4.152 -34.772	1.331	1.00	0.00
ATOM	624	0P2	THY	70	-5.468 -36.086	-0.405	1.00	0.00
ATOM	625	05'	THY	70	-6.411 -33.936	0.539	1.00	0.00
ATOM	626	C5'	THY	70	-7.631 -34.074	-0.173	1.00	0.00
ATOM	627	C4'	THY	70	-8.608 -32.922	0.090	1.00	0.00
ATOM	628	04'	THY	70	-8.956 -32.853	1.457	1.00	0.00
ATOM	629	C1'	THY	70	-9.656 -31.641	1.621	1.00	0.00
ATOM	630	N1	THY	70 -	-9.796 -31.260	3.047	1.00	0.00
ATOM	631	C6	THY	70	-8.713 -31.316	3.885	1.00	0.00
ATOM	632	C5	THY	70	-8.815 -30.941	5.185	1.00	0.00
ATOM	633	<b>C7</b>	THY	70	-7.541 -31.042	5.997	1.00	0.00
ATOM	634	C4	THY	70	-10.070 -30.477	5.744	1.00	0.00
ATOM	635	04	THY	70	-10.257 -30.103	6.899	1.00	0.00
ATOM	636	N3	THY	70	-11.118 -30.484	4.841	1.00	0.00
ATOM	637	C2	THY	70	-11.031 -30.790	3.495	1.00	0.00
ATOM	638	02	THY	70	-11.991 -30.601	2.755	1.00	0.00
ATOM	639	C3'	THY	70	-8.091 -31.509	-0.211	1.00	0.00
ATOM	640	C2'	THY	70	-8.786 -30.649	0.854	1.00	0.00
ATOM	641	03'	THY	70	-8.432 -31.105	-1.524	1.00	0.00
ATOM	642	P	ADE	71	-8.005 -29.657	-2.101	1.00	0.00
ATOM	643	0P1	ADE	71	-6.765 -29.235	-1.410	1.00	0.00
ATOM	644	0P2	ADE	71	-8.048 -29.710	-3.577	1.00	0.00
ATOM	645	05'	ADE	71	-9.160 -28.667	-1.592	1.00	0.00
ATOM	646	C5'	ADE	71	-10.469 -28.660	-2.122	1.00	0.00
ATOM	647	C4'	ADE	71	-11.291 -27.602	-1.370	1.00	0.00
ATOM	648	04'	ADE	71	-11.577 -28.035	-0.037	1.00	0.00
ATOM	649	C1'	ADE	71	-11.353 -26.948	0.838	1.00	0.00
ATOM	650	N9	ADE	71	-11.128 -27.319	2.253	1.00	0.00
ATOM	651	C8	ADE	71	-9.979 -27.822	2.795	1.00	0.00
ATOM	652	N7	ADE	71	-9.908 -27.785	4.093	1.00	0.00
ATOM	653	C5	ADE	71	-11.150 -27.282	4.448	1.00	0.00
ATOM	654	C6	ADE	71	-11.725 -27.002	5.697	1.00	0.00
ATOM	655	N6	ADE	71	-11.065 -27.238		1.00	0.00
ATOM	656	N1	ADE	71	-12.945 -26.439		1.00	0.00
ATOM	657	C2	ADE	71	-13.574 -26.194		1.00	0.00
ATOM	658	N3	ADE	71	-13.144 -26.421	3.348	1.00	0.00
ATOM	659	C4	ADE	71	-11.907 -26.987		1.00	0.00
1 TOP	000	on!	4 D.E.	71	10 514 00 070	1 000	1 00	0.00

ATOM 660 C3' ADE 71 -10.514 -26.276 -1.228 1.00 0.00

```
97
                                                                   98
ATOM
        661 C2' ADE
                         71
                                -10.062 -26.415
                                                   0.222
                                                         1.00 0.00
        662 03'
                 ADE
                         71
ATOM
                                -11.401 -25.189
                                                 -1.391
                                                          1.00 0.00
        663 P
                 GUA
                                -10.914 -23.657
ATOM
                         72
                                                 -1.532
                                                          1.00
                                                                0.00
             OP1 GUA
                         72
                                -10.912 -23.277
ATOM
        664
                                                 -2.959
                                                          1.00
                                                                0.00
             OP2 GUA
                                 -9.711 -23.424
ATOM
        665
                         72
                                                 -0.694
                                                          1.00
                                                                0.00
             05' GUA
                                                 -0.801
ATOM
        666
                         72
                                -12.134 -22.920
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             C5'
                 GUA
                                -13.473 -23.077
        667
                         72
                                                 -1.225
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        668
             C4'
                 GUA
                                -14.410 -22.559
                         72
                                                  -0.130
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        669
             04'
                 GUA
                         72
                                -14.181 -23.281
                                                   1.074
                                                          1.00
                                                                0.00
        670 C1'
                 GUA
                         72
                                -13.790 -22.415
ATOM
                                                   2.125
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        671
             N9
                 GUA
                         72
                                -12.720 -23.042
                                                   2.938
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        672 C8
                 GUA
                         72
                                -11.549 -23.601
                                                   2.493
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        673
             N7
                 GUA
                         72
                                -10.720 -23.959
                                                   3.432
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        674
             C5.
                 GUA
                         72
                                -11.417 -23.658
                                                   4.597
                                                          1.00 0.00
ATOM
        675
             60
                 GUA
                         72
                                -11.039 -23.854
                                                   5.956
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        676
             06
                  GUA
                         72
                                 -9.966 -24.288
                                                   6.370 1.00
                                                                0.00
             N1
ATOM
        677
                  GUA
                         72
                                -12.042 -23.505
                                                   6.851 1.00
                                                                0.00
ATOM
        678
             C2
                  GUA
                         72
                                -13.269 -22.993
                                                   6.480
                                                          1.00
                                                                0.00
                                                                0.00
ATOM
        679
             N2
                 GUA
                         72
                                -14.119 -22.651
                                                   7.450
                                                          1.00
             N3
                  GUA
ATOM
        680
                         72
                                -13.614 -22.772
                                                   5.201
                                                         1.00
                                                                0.00
             C4
                  GUA
ATOM
        681
                         72
                                -12.654 -23.131
                                                   4.309
                                                          1.00
                                                                0.00
        682
             C3'
                 GUA
                         72
                                -14.158 -21.082
ATOM
                                                   0.189
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        683
             C2'
                 GUA
                         72
                                -13.245 -21.183
                                                   1.409
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        684
             03'
                 GUA
                         72
                                -15.395 -20.450
                                                   0.468
                                                          1.00
                                                                0.00
             P
                                                                0.00
ATOM
        685
                  GUA
                         73
                                -15.520 -18.852
                                                   0.681
                                                          1.00
             OP1 GUA
ATOM
        686
                         73
                                -16.916 -18.458
                                                   0.394
                                                          1.00
                                                                0.00
             OP2 GUA
ATOM
        687
                         73
                                -14.406 -18.190
                                                   -0.033
                                                          1.00
                                                                0.00
             05'
                 GUA
ATOM
        688
                         73
                                -15.264 - 18.694
                                                   2.260
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 GUA
             C5'
ATOM
        689
                         73
                                -16.210 -19.163
                                                   3.198
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C4'
                  GUA
        690
ATOM
                         73
                                -15.642 -19.060
                                                   4.614
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 GUA
ATOM
        691
             04'
                         73
                                -14.466 -19.841
                                                   4.732
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             C1'
                 GUA
                                                          1.00
        692
                         73
                                -13.617 -19.204
                                                   5.657
                                                                 0.00
ATOM
        693
             N9
                  GUA
                         73
                                -12.236 - 19.729
                                                   5.569
                                                          1.00
                                                                 0.00
             68
                  GUA
                         73
                                                          1.00
ATOM
        694
                                -11.429 -19.851
                                                   4.468
                                                                 0.00
             N7
                  GUA
                         73
ATOM
        695
                                -10.270 -20.405
                                                   4.704
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C5
                  GUA
                               -10.300 -20.644
                                                          1.00
ATOM
        696
                         73
                                                   6.075
                                                                 0.00
ATOM
        697
             63
                  GUA
                         73
                                 -9.318 -21.227
                                                   6.931
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        698
              06
                  GUA
                         73
                                 -8.209 -21.651
                                                   6.614
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N1
                  GUA
                                 -9.743 -21.311
ATOM
        699
                         73
                                                   8.254
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        700
              C2
                  GUA
                         73
                                 -10.978 -20.884
                                                   8.703
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        701
              N2
                  GUA
                         73
                                -11.248 -20.978
                                                  10.006
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        702
              N3
                  GUA
                         73
                                 -11.900 -20.336
                                                   7.903
                                                          1.00
                                                                 0.00
              C4
                  GUA
ATOM
        703
                         73
                                -11.501 -20.241
                                                   6.608
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         704
              C3'
                 GUA
                         73
                                 -15.238 -17.630
                                                   5.018 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         705
             C2'
                  GUA
                                -13.721 -17.763
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         73
                                                   5.179
              03'
                 GUA
         706
ATOM
                         73
                                 -15.902 -17.313
                                                   6.231
                                                          1.00
                                                                 0.00
             P
                  GUA
                                 -15.785 -15.868
ATOM
         707
                         74
                                                   6.945
                                                          1.00
                                                                 0.00
              OP1 GUA
ATOM
         708
                         74
                                 -17.145 -15.425
                                                   7.324
                                                                 0.00
                                                          1.00
              OP2 GUA
ATOM
         709
                         74
                                 -14.925 -14.989
                                                   6.122
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             05' GUA
                                 ~14.982 -16.245
         710
                         74
                                                   8.290
                                                          1.00 0.00
```

```
99
                                                                   100
        711 C5' GUA
                                                         1.00 0.00
ATOM
                         74
                                -15.582 -17.041
                                                   9.296
ATOM
        712 C4'
                 GUA
                         74
                                                          1.00
                                -14.619 -17.272
                                                  10.465
                                                                0.00
ATOM
        713 04'
                 GUA
                         74
                                -13.449 -17.927
                                                   9.999
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        714 C1'
                 GUA
                         74
                                -12.310 -17.275
                                                  10.517
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        715
             N9
                 GUA
                         74
                                -11.146 -17.482
                                                   9.630
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        716
             C8
                 GUA
                         74
                                -11.053 -17.259
                                                   8.280
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        717
             N7
                  GUA
                         74
                                 -9.903 - 17.594
                                                   7.762
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        718 C5
                 GUA
                         74
                                ~-9.174 -18.068
                                                   8.849
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        719
             C6
                  GUA
                         74
                                 -7.854 -18.608 · 8.909
                                                          1.00
                                                                0.00
                  GUA
ATOM
        720
             06
                         74
                                 -7.070 -18.787
                                                   7.980
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N1
                  GUA
ATOM
        721
                         74 .
                                 -7.483 -18.962
                                                  10.203
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        722
             C2
                  GUA
                         74
                                 -8.298 -18.837
                                                  11.310
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        723
             N2
                  GUA
                         74
                                 -7.808 -19.197
                                                  12.499
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        724
             N3
                  GUA
                         74...
                                 -9.543 -18.349
                                                 11.253
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        725
             C4
                  GUA
                         74
                                 -9.922 -17.985 9.999
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        726
             C3'
                  GUA
                         74
                                -14.152 -15.964
                                                 11.125
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C2'
ATOM
        727
                  GUA
                         74
                                -12.751 -15.816
                                                  10.537
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        728
             03'
                 GUA
                         74
                                -14.125 -16.141
                                                  12.534
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
        729
             P
                         75
                                -13.784 -14.936
                                                  13.559
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OP1 THY
ATOM
        730
                         75
                                -13.520 -13.704
                                                  12.783
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OP2 THY
ATOM
        731
                         75
                                -14.814 -14.929
                                                  14.621
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        732
             05' THY
                         75
                                -12.390 -15.415
                                                  14.211
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C5'
                 THY
ATOM
        733
                         75
                                -12.331 -16.529
                                                  15.082
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        734
             C4'
                  THY
                         75
                                -10.894 -16.777
                                                  15.551
                                                           1.00
                                                                 0.00
        735
             04'
                  THY
                         75
ATOM
                                 -10.064 -16.945
                                                  14.414
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C1' THY
                         75
ATOM
        736
                                 -8.906 -16.152
                                                 14.549
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        737
             N1
                  THY
                         75
                                 -8.372 -15.797
                                                  13.205
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
        738
             6
                         75
                                 -9.169 -15.160
                                                  12.279
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        739
             C5
                  THY
                         75
                                 -8.702 -14.858
                                                  11.039
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        740
             C7
                  THY
                         75
                                 -9.642 -14.104
                                                  10.115 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        741
             C4
                  THY
                         75
                                 -7.367 -15.231
                                                  10.624
                                                          1.00
                                                                 0.00
             04
                  THY
ATOM
        742
                         75
                                 -6.882 -15.055
                                                   9.509
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        743
             N3
                  THY
                         75
                                  -6.628 -15.851
                                                  11.614
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        744
             C2
                  THY
                         75
                                 -7.058 -16.144
                                                  12.896
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        745
             02
                  THY
                         75
                                  -6.291 -16.679
                                                  13.694
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        746
              C3'
                  THY
                         75
                                 -10.307 -15.603
                                                  16.356
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        747
             C2'
                  THY
                         75
                                  -9.409 -14.932
                                                  15.319
                                                           1.00
                                                                 0.00
              03'
                  THY
ATOM
        748
                         75
                                  -9.564 -16.097
                                                  17.460
                                                           1.00
                                                                 0.00
             P
ATOM
        749
                  THY
                         76
                                  -8.987 -15.126
                                                  18.622
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP1 THY
ATOM
        750
                                  -9.329 -15.722
                                                  19.932
                         76
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        751
              OP2 THY
                         76
                                  -9.391 -13.734
                                                  18.322
                                                           1.00
                                                                 0.00
              05'
                 THY
ATOM
        752
                                  -7.390 -15.223
                                                  18.429
                         76
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        753
              C5' THY
                         76
                                  -6.672 -16.360
                                                  18.871
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                                                 0.00
ATOM
        754
              C4' THY
                         76
                                  -5.211 -16.277
                                                  18.418
                                                           1.00
              04'
                  THY
ATOM
        755
                         76
                                  -5.201 -16.091
                                                  17.013
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C1'
                  THY
ATOM
         756
                         76
                                  -4.140 -15.244
                                                  16.644
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         757
              N1
                  THY
                         76
                                  -4.463 -14.600
                                                  15.336
                                                                 0.00
                                                           1.00
ATOM
         758
              C6
                  THY
                         76
                                  -5.602 -13.835
                                                  15.209
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C5
                  THY
         759
                         76
                                  -5.906 -13.211
                                                   14.044
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         760
             C7
                  THY
                         76
                                  -7.167 -12.366 14.027 1.00 0.00
```

```
101
                                                                   102
ATOM
        761 C4
                                 -5.069 -13.342 12.872 1.00 0.00
                 THY
                         76
             04
                 THY
                                 -5.269 -12.801 11.788
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        762
                         76
                 THY
                                 -3.980 -14.179
                                                  13.049
ATOM
        763
            N3
                         76
                                                          1.00
                                                                0.00
                 THY
        764 C2
                         76
                                 -3.627 -14.815
                                                  14.233
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                 THY
                                 -2.611 -15.504 14.276
ATOM
        765
             02
                         76
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 THY
        766
            C3'
                         76
                                 -4.417 -15.109
                                                 19.037
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
        767
             C2'
                 THY
                         76
                                 -4.102 -14.245
                                                  17.808
                                                          1.00
                                                                 0.00
             03'
ATOM
                 THY
                                 -3.279 -15.624
                                                  19.726
                                                          1.00
                                                                 0.00
        768
                         76
ATOM
        769
             P
                  ADE
                         77
                                 -2.152 -14.683
                                                  20.421
                                                          1.00
                                                                 0.00
        770
             OP1 ADE
                         77
                                 -2.763 -13.399
                                                  20.824
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             OP2 ADE
ATOM
        771
                         77
                                 -1.385 -15.475
                                                  21.411
                                                          1.00
                                                                 0.00
             05'
                 ADE
                         77
                                 -1.158 -14.412
                                                  19.190
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        772
             C5'
                 ADE
ATOM
        773
                         77
                                 -0.600 -15.502
                                                  18.486
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C4'
                 ADE
                         77
                                  -0.017 -15.037
                                                  17.160
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        774
ATOM
        775
             04'
                 ADE
                         77
                                  -0.941 -14.287
                                                  16.411 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        776
             C1'
                  ADE
                         77
                                  -0.184 -13.656
                                                  15.410 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        777
             N9
                  ADE
                         77
                                  -0.987 -12.663
                                                  14.678
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        778
             С8
                  ADE
                         77
                                  -2.135 -12.027
                                                  15.078 1.00
                                                                 0.00
                                                  14.118
ATOM
        779
             N7
                  ADE
                         77
                                  -2.754 - 11.401
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  ADE
                                                  13.015
ATOM
        780
             C5
                         77
                                  -1.934 -11.608
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                  -2.038 -11.238
ATOM
        781
             C6
                  ADE
                         77
                                                  11.663
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                  -3.095 -10.578
ATOM
        782
             N6
                  ADE
                         77
                                                  11.190
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                                 0.00
ATOM
        783
             N1
                  ADE
                         77
                                  -1.034 -11.566
                                                  10.826
                                                          1.00
ATOM
              C2
                  ADE
                                   0.012 - 12.232
                                                  11.306
                                                           1.00
                                                                 0.00
        784
                         77
ATOM
        785
              N3
                  ADE
                         77
                                   0.205 - 12.697
                                                  12.537
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C4
                  ADE
                         77
                                  -0.824 -12.335
                                                  13.357
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        786
ATOM
         787
              C3'
                  ADE
                         77
                                   1.201 -14.120
                                                  17.296
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         788
              C2'
                  ADE
                         77
                                   0.953 - 13.048
                                                   16.228
                                                           1.00
                                                                 0.00
              03'
ATOM
         789
                  ADE
                         77
                                   2.368 -14.884
                                                   17.053
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  GUA
                                                  17.600
ATOM
         790
              P
                         78
                                   3.813 - 14.433
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         791
              OP1 GUA
                         78
                                   3.633 - 13.794
                                                  18.925
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OP2 GUA
         792
                                   4.700 -15.606
                                                  17.463
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         78
              05'
                  GUA
                                                   16.531
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         793
                         78
                                   4.261 -13.311
              C5'
                  GUA
                                   5.173 -13.613
                                                   15.491
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         794
                         78
         795
              C4'
                  GUA
                         78
                                   5.203 -12.503
                                                   14.440
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
                  GUA
                                   3.901 -12.138
                                                                 0.00
ATOM
         796
              04'
                                                   14.026
                                                           1.00
                         78
              C1'
                  GUA
                                   3.986 -10.833
                                                   13.501
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         797
                         78
ATOM
         798
              N9
                  GUA
                                   2.642 -10.225
                                                   13.360
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          78
ATOM
         799
              68
                  GUA
                          78
                                   1.678 -10.033
                                                   14.318
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         800
              N7
                  GUA
                          78
                                   0.585
                                          -9.474
                                                   13.876
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                          -9.268
                                                   12.524
                                                                  0.00
ATOM
         801
              C5
                  GUA
                          78
                                   0.840
                                                           1.00
ATOM
         802
              6
                  GUA
                          78
                                   0.021
                                          -8.687
                                                   11.508
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              06
                  GUA
                                  -1.112
                                          -8.223
                                                   11.616
                                                           1.00
                                                                  0.00
         803
                          78
              N1
                  GUA
                                   0.639
                                          -8.686
                                                   10.262
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         804
                          78
ATOM
         805
              C2
                  GUA
                          78
                                   1.904
                                          -9.179
                                                   10.018
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         806
              N2
                  GUA
                          78
                                   2.396
                                          -9.053
                                                    8.784
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         807
              N3
                  GUA
                          78
                                   2.675
                                          -9.724
                                                   10.971
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  GUA
                                                                  0.00
 ATOM
         808
              C4
                          78
                                   2.091
                                          -9.737
                                                   12.198
                                                           1.00
              C3'
                  GUA
                                   5.881 -11.205
                                                   14.912
                                                                  0.00
 ATOM
         809
                          78
                                                           1.00
                                   4.831 -10.143 14.565
 ATOM
         810
              C2' GUA
                          78
                                                          1.00
                                                                 0.00
```

					(53)				特開としし	13-13:
	103								104	
ATOM	811	03'	GUA	78		-11.087	14.212	1.00	0.00	
ATOM	812	P	GUA	79		-9.778	14.272	1.00	0.00	
ATOM	813	0P1		79		-10.207	14.016	1.00	0.00	
ATOM	814	0P2	GUA	79	7.737	-9.010	15.493	1.00	0.00	
ATOM	815	05'	GUA	79	7.552	-8.961	12.987	1.00	0.00	
ATOM	816	C5'	GUA	79	7.768	-9.467	11.684	1.00	0.00	
ATOM	817	C4'	GUA	79	7.186	-8.516	10.639	1.00	0.00	
ATOM	818	04'	GUA	79	5.800	-8.343	10.874	1.00	0.00	
ATOM	819	C1'	GUA	79	5.462	-6.998	10.628	1.00	0.00	
ATOM	820	N9	GUA	79	4.194	-6.667	11.317	1.00	0.00	
ATOM	821	C8	GUA	79	3.870	-6.837	12.639	1.00	0.00	
ATOM	822	N7	GUA	79	2.645	-6.507	12.937	1.00	0.00	
ATOM	823	C5	GUA	79	2.117	-6.071	11.728	1.00	0.00	
ATOM	824	C6	GUA	79	0.816	-5.570	11.421	1.00	0.00	
ATOM:	825	06	GUA	79	-0.137	-5.418	12.183	1.00	0.00	
ATOM	826	N1	GUA	79	0.681	-5.230	10.079	1.00	0.00	
ATOM		C2	GUA	79	1.681	-5.354	9.137	1.00	0.00	
ATOM	828	N2	GUA	79	1.431	-4.935	7.894	1.00	0.00	
ATOM	829	N3	GUA	79	2.902	-5.828	9.422	1.00	0.00	
ATOM	830	C4	GUA	79	3.057	-6.165	10.730	1.00	0.00	
ATOM	831	C3'	GUA	79	7.814	-7.113	10.699	1.00	0.00	
ATOM	832	C2'	GUA	79	6.657	-6.265	11.228	1.00	0.00	
ATOM	833	03'	GUA	79	8.224	-6.747	9.392	1.00	0.00	
ATOM	834	P	GUA	80	8.997	-5.362	9.083	1.00	0.00	
ATOM	835		GUA	80	9.569	-4.845	10.345	1.00	0.00	
ATOM	836		GUA	80	9.875	-5.573	7.909	1.00	0.00	
ATOM	837		GUA	80	7.791	-4.389	8.643	1.00	0.00	
ATOM	838	C5'	GUA	80	7.124	-4.570	7.407	1.00	0.00	
ATOM	839	C4'	GUA	80	5.967	-3.575	7.280	1.00	0.00	
ATOM	840	04'		80 '	5.018	-3.805	8.306	1.00	0.00	
ATOM	841	C1'	GUA	80	4.461	-2.566	8.677	1.00	0.00	
ATOM	842	N9	GUA	80	3.777	-2.656	9.983	1.00	0.00	
ATOM	843	C8	GUA	80	4.269			1.00		
ATOM	844	N7	GUA	80	3.402	-3.092	12.154	1.00	0.00	
ATOM	845	C5	GUA	80	2.246	-2.595	11.563	1.00	0.00	
ATOM	846	C6	GUA	80	0.949	-2.370	12.118	1.00	0.00	
ATOM	847	06	GUA	80	0.567	-2.581	13.267	1.00	0.00	
ATOM	848	N1	GUA	80	0.058	-1.851	11.184	1.00	0.00	
ATOM	849	C2	GUA	80	0.368	-1.580	9.869	1.00	0.00	•
ATOM	850	N2	GUA	80	-0.583	-1.033	9.108	1.00	0.00	
ATOM	851	N3	GUA	80	1.579	-1.806	9.340	1.00	0.00	
ATOM	852	C4	GUA	80	2.469	-2.315	10.236	1.00	0.00	
ATOM	853	C3'	GUA	80	6.400	-2.107	7.439	1.00	0.00	
ATOM	854	C2'	GUA	80	5.707	-1.688	8.733	1.00	0.00	
ATOM	855	03'	GUA	80	5.923	-1.325	6.362		0.00	
ATOM		05'	CYT					1.00		
ATOM	856 857	C5'	CYT	81 81	-8.829 -8.367	1.412 2.306	13.066 12.075	1.00	0.00 0.00	
ATOM	858	C4'	CYT	81	-7.209	1.683	11.291	1.00	0.00	
ATOM	859		CYT	81	-6.181	1.252	12.158	1.00	0.00	
ATOM	860		CYT	81	-5.374	0.372	11.408	1.00	0.00	
AIUM	000	01	011	01	3.314	0.312	11.400	1.00	0.00	

	105								106
ATOM	861	N1	CYT	81	-4.493	-0.455	12.265	1.00	0.00
ATOM	862	C6	CYT	81	-4.990	-1.033	13.405	1.00	0.00
ATOM	863	C5	CYT	81	-4.249	-1.884	14.148	1.00	0.00
ATOM	864	C4	CYT	81	-2.910	-2.141	13.700	1.00	0.00
			CYT						
ATOM	865	N4		81	-2.102	-2.947	14.389	1.00	0.00
ATOM	866	N3	CYT	81	-2.442	-1.599	12.569	1.00	0.00
ATOM	867	C2	CYT	81	-3.211	-0.766	11.815	1.00	0.00
ATOM	868	02	CYT	81	-2.770	-0.319	10.759	1.00	0.00
ATOM	869	C3'	CYT	81	-7.600	0.422	10.504	1.00	0.00
ATOM	870	C2'	CYT	81	-6.416	-0.514	10.741	1.00	0.00
ATOM	871	03'	CYT	81	-7.789	0.754	9.138	1.00	0.00
ATOM	872	P	CYT	82	-8.206	-0.343	8.024	1.00	0.00
ATOM	873		CYT	82	-8.956	0.353	6.956	1.00	0.00
ATOM	874		CYT	82	-8.818	-1.497	8.720	1.00	0.00
ATOM.	875	05'	CYT	82	-6.787	-0.824	7.419	1.00	0.00
ATOM	876	C5'	CYT	82	-5.984	0.044	6.638	1.00	0.00
ATOM	877	C4'	CYT	82	-4.713	-0.666	6.152	1.00	0.00
ATOM	878	04'	CYT	82	-3.930	-1.087	7.251	1.00	0.00
ATOM	879	C1'	CYT	82	-3.416	-2.385	7.020	1.00	0.00
ATOM	880	N1	CYT	82	-3.289	-3.065	8.327	1.00	0.00
ATOM	881	C6	CYT	82	-4.366	-3.070	9.167	1.00	0.00
ATOM	882	C5	CYT	82	-4.333	-3.664	10.372	1.00	0.00
ATOM	883	C4	CYT	82	-3.097	-4.294	10.745	1.00	0.00
ATOM	884	N4	CYT	82	-2.982	-4.916	11.919	1.00	0.00
ATOM	885	N3	CYT	82	-2.049	-4.313	9.908	1.00	0.00
ATOM	886	C2	CYT	82	-2.114	-3.721	8.681	1.00	0.00
ATOM	887	02	CYT	82	-1.155	-3.785	7.917	1.00	0.00
ATOM	888	C3'	CYT	82	-5.002	-1.923	5.318	1.00	0.00
ATOM	889	C2 <b>'</b>	CYT	82	-4.515	-3.060	6.204	1.00	0.00
ATOM	890	03'	CYT	82	-4.293	-1.828	4.091	1.00	0.00
ATOM	891	P	CYT	83	-4.359	-2.966	2.946	1.00	0.00
ATOM	892	0P1	CYT	83	-4.118	-2.315	1.639	1.00	0.00
ATOM	893		CYT	83	-5.584	-3.769	3.153	1.00	0.00
ATOM	894	05'	CYT	83	-3.085	-3.895	3.290	1.00	0.00
ATOM	895	C5'	CYT	83.	-1.759	-3.457	3.046	1.00	0.00
ATOM	896	C4'	CYT	83	-0.758	-4.554	3.432	1.00	0.00
ATOM	897	04'	CYT	83	-0.894	-4.856	4.804	1.00	0.00
ATOM	898	C1'	CYT	83	-0.596	-6.217	5.029	1.00	0.00
ATOM	899	N1	CYT	83	-1.317	-6.651	6.251	1.00	0.00
ATOM	900	C6	CYT	83	-2.633	-6.303	6.400	1.00	0.00
ATOM	901	C5	CYT	83	-3.320	-6.569	7.529	1.00	0.00
ATOM	902	C4	CYT	83	-2.602	-7.242	8.575	1.00	0.00
ATOM	903	N4	CYT	83	-3.203	-7.522	9.733	1.00	0.00
ATOM	904	N3	CYT	83	-1.327	-7.624	8.410	1.00	0.00
ATOM	905	C2	CYT	83	-0.656	-7.358	7.252	1.00	0.00
ATOM	906	02	CYT	83	0.501	-7.752	7.114	1.00	0.00
ATOM	907	C3'	CYT	83	-0.991	-5.874	2.677	1.00	0.00
ATOM	908	C2'	CYT	83	-1.174	-6.902	3.795	1.00	0.00
ATOM	909	03'	CYT	83	0.128	-6.144	1.847	1.00	0.00
ATOM	910	P	THY	84	0.154	-7.367	0.786	1.00	0.00

```
107
                                                                    108
ATOM
        911 OP1 THY
                                  1.215 -7.091 -0.206 1.00 0.00
                         84
ATOM
        912
             OP2 THY
                         84
                                 -1.228
                                         -7.630
                                                   0.329
                                                          1.00
                                                                 0.00
             05' THY
                                         -8.616
ATOM
        913
                         84
                                  0.627
                                                   1.682 1.00
                                                                 0.00
             C5'
                 THY
                                  1.954 -8.717
ATOM
        914
                         84
                                                   2.159
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C4'
                 THY
                                  2.044 -9.817
ATOM
        915
                         84
                                                   3.219
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 THY
                                  1.174 - 9.544
ATOM
        916
             04'
                         84
                                                   4.298
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        917
             C1'
                 THY
                         84
                                  0.973 -10.752
                                                   4.992
                                                          1.00
                                                                 0.00
        918 N1
                  THY
                                  -0.202 -10.654
ATOM
                         84
                                                   5.900
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C6
                  THY
ATOM
        919
                         84
                                  -1.406 -10.188
                                                   5.421 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        920
             C5
                  THY
                                  -2.506 -10.144
                                                          1.00
                         84
                                                   6.211
                                                                 0.00
ATOM
        921
             C7
                  THY
                                  -3.779 -9.631
                                                           1.00
                         84
                                                   5.567
                                                                 0.00
                                  -2.463 -10.578
ATOM
        922
             C4
                  THY
                         84
                                                   7.590
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
        923
             04
                         84
                                  -3.421 -10.609
                                                    8.357 1.00 0.00
             N3
                  THY
ATOM
        924
                         84
                                  -1.209 - 10.981
                                                    8.017
                                                          1.00
                                                                0.00
             C2
                  THY
ATOM
        925
                         84
                                  -0.072 -11.066
                                                    7.229
                                                           1.00
                                                                 0.00
             02
                  THY
ATOM
        926
                         84
                                   0.972 - 11.506
                                                    7.705
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C3'
                 THY
        927
                                   1.638 -11.213
ATOM
                         84
                                                    2.715
                                                          1.00 0.00
             C2' THY
                                   0.717 - 11.720
ATOM
        928
                         84
                                                    3.838
                                                          1.00
                                                                 0.00
             03'
                 THY
ATOM
        929
                                   2.816 -11.976
                         84
                                                    2.510
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        930
             P
                  ADE
                                   2.794 -13.536
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         85
                                                    2.094
ATOM
             OP1 ADE
        931
                         85
                                   1.550 - 13.822
                                                    1.346
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OP2 ADE
                                   4.106 -13.892
ATOM
        932
                         85
                                                    1.511
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        933
             05' ADE
                                   2.689 -14.237
                         85
                                                    3.535
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C5'
ATOM
        934
                 ADE
                                   3.656 -13.981
                         85
                                                    4.535
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C4'
                  ADE
                                   3.220 -14.614
ATOM
        935
                         85
                                                    5.855
                                                           1.00
                                                                 0.00
              04' ADE
ATOM
        936
                         85
                                   2.020 -14.052
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                    6.348
ATOM
         937
              C1' ADE
                                   1.387 -15.033
                         85
                                                    7.138
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        938
              N9
                  ADE
                                  -0.026 -14.676
                                                    7.375
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         85
ATOM
        939
              С8
                  ADE
                         85
                                  -0.935 -14.206
                                                    6.463
                                                          1.00
                                                                 0.00
              N7
                  ADE
                                  -2.091 -13.885
ATOM
        940
                         85
                                                    6.973 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         941
              C5
                  ADE
                          85
                                  -1.944 -14.194
                                                    8.322
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        942
              6
                  ADE
                                  -2.807 -14.081
                                                    9.427
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         85
ATOM
         943
              N6
                  ADE
                          85
                                  -4.036 -13.573
                                                    9.322
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         944
              N1
                  ADE
                          85
                                  -2.379 -14.515
                                                   10.629
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         945
              C2
                  ADE
                          85
                                  -1.156 - 15.025
                                                   10.725
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         946
              N3
                  ADE
                          85
                                  -0.232 -15.153
                                                    9.775
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C4
                  ADE
                                  -0.698 -14.712
         947
                          85
                                                    8.573
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C3'
                  ADE
ATOM
         948
                                   2.952 -16.115
                                                           1.00
                          85
                                                    5.727
                                                                 0.00
ATOM
         949
              C2'
                  ADE
                          85
                                   1.505 -16.235
                                                    6.215
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              03' ADE
         950
                          85
                                   3.892 -16.787
                                                    6.543
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              P
                  ADE
                                                           1.00
         951
                          86
                                   3.931 -18.385
                                                    6.668
                                                                 0.00
ATOM
         952
              OP1 ADE
                                   5.340 -18.805
                                                    6.845
                                                           1.00
                          86
                                                                 0.00
              OP2 ADE
                                   3.112 -18.961
ATOM
         953
                          86
                                                    5.578
                                                           1.00
                                                                 0.00
         954
              05' ADE
                                   3.155 -18.625
                                                    8.046
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
                          86
ATOM
         955
              C5'
                  ADE
                          86
                                   3.699 -18.164
                                                    9.261
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         956
              C4'
                  ADE
                          86
                                   2.832 -18.612
                                                   10.429
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         957
              04' ADE
                          86
                                   1.552 - 18.019
                                                   10.330
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C1' ADE
                                                   10.454
ATOM
         958
                          86
                                   0.554 - 19.011
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                  -0.639 -18.570
ATOM
         959
              N9
                  ADE
                          86
                                                    9.701
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         960
              C8 ADE
                          86
                                  -0.786 -18.407
                                                    8.347 1.00 0.00
```

```
109
                                                                   110
                                                         1.00 0.00
ATOM
        961
             N7
                 ADE
                         86
                                 -1.927 -17.886
                                                   7.987
                 ADE
                                 -2.592 -17.702
                                                   9.192 1.00
                                                                0.00
ATOM
        962
             C5
                         86
                                 -3.863 -17.194
                                                   9.521
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        963
             60
                 ADE
                         86
                 ADE
                                 -4.719 -16.751
                                                   8.599
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        964
             N6
                         86
                                                          1.00
                 ADE
                                 -4.210 -17.129
                                                  10.819
                                                                0.00
ATOM
        965
             N1
                         86
                                 -3.351 -17.547
                                                                0.00
ATOM
             C2
                 ADE
                                                  11.744
                                                          1.00
        966
                         86
                                                                0.00
                                 -2.135 -18.052
ATOM
        967
             N3
                 ADE
                         86
                                                 11.565
                                                          1.00
                 ADE
             C4
                                 -1.812 -18.109
                                                  10.246
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        968
             C3'
                 ADE
ATOM
        969
                         86
                                  2.617 -20.129
                                                  10.461
                                                          1.00
                                                                0.00
             C2' ADE
ATOM
        970
                         86
                                  1.213 - 20.260
                                                   9.874
                                                         1.00
                                                                0.00
             03' ADE
                                  2.694 -20.546
                                                  11.810
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        971
                         86
             P
                 CYT
                                  2.651 -22.098
                                                  12.237
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        972
                         87
             OP1 CYT
                                  3.498 -22.247
                                                 13.442
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        973
                         87
        974
             OP2 CYT
                         87
                                  2.925 -22.921
                                                 11.036
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                                  1.111 -22.288
ATOM
        975
             05' CYT
                         87
                                                 12.664
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C5' CYT
                                  0.646 -21.787
                                                  13.905
ATOM
        976
                         87
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C4' CYT
                                  -0.880 -21.705
                                                  13.942
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        977
                         87
ATOM
        978
             04' CYT
                         87
                                  -1.369 -21.021
                                                  12.808
                                                          1.00
                                                                 0.00
        979
             C1' CYT
                         87
                                  -2.738 -21.332
                                                  12.687
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
             N1
                  CYT
                                  -3.223 -21.070
                                                  11.309
                                                          1.00
                                                                 0.00
        980
                         87
ATOM
        981
             C6
                  CYT
                         87
                                  -2.427 -21.366
                                                  10.234
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         982
             C5
                  CYT
                         87
                                  -2.818 -21.089
                                                   8.971
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         983
              C4
                  CYT
                         87
                                  -4.113 -20.500
                                                   8.803
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         984
              N4
                  CYT
                         87
                                  -4.535 -20.143
                                                   7.591
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  CYT
                                  -4.899 -20.239
ATOM
         985
              N3
                         87
                                                   9.856
                                                          1.00
                                                                 0.00
              C2 CYT
                                  -4.491 -20.526
                                                  11.124
ATOM
         986
                         87
                                                          1.00
                                                                 0.00
              02 CYT
                                  -5.238 -20.295
                                                  12.071
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         987
                         87
              C3'
                  CYT
                                  -1.588 -23.066
                                                  13.928
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         988
                         87
              C2' CYT
                                  -2.751 -22.826
                                                  12.966
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         989
                         87
              03'
                  CYT
                                  -1.999 -23.391
                                                  15.247
                                                                 0.00
         990
                         87
                                                           1.00
ATOM
                  CYT
                                  -2.813 -24.742
                                                  15.606
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         991
              P
                         88
              OP1 CYT
                                  -2.487 -25.771
                                                  14.592
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         992
                         88
              OP2 CYT
                                  -2.611 -25.035
                                                 17.043
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         993
                         88
ATOM
         994
              05' CYT
                         88
                                  -4.353 -24.302 15.396
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C5' CYT
ATOM
         995
                         88
                                  -4.961 -23.305
                                                  16.199
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         996
              C4' CYT
                         88
                                  -6.325 -22.919
                                                  15.616
                                                          1.00
                                                                 0.00
              04' CYT
                                  -6.169 -22.503
                                                  14.275
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         997
                         88
 ATOM
         998
              C1' CYT
                         88
                                  -7.367 -22.741
                                                  13.569
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         999
              N1
                  CYT
                         88
                                  -7.075 -22.890
                                                  12.122
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
        1000
              60
                 CYT
                          88
                                  -5.958 -23.570
                                                  11.718
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  CYT
                                  -5.592 -23.630
                                                  10.421
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
        1001
              C5
                         88
                                                          1.00
 ATOM
        1002
              C4
                  CYT
                         88
                                  -6.449 - 22.972
                                                   9.475
                                                                 0.00
                                  -6.141 -22.951
        1003
              N4
                  CYT
                                                    8.178
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
                          88
        1004
 ATOM
              N3
                  CYT
                          88
                                  -7.599 -22.402
                                                   9.864
                                                          1.00
                                                                 0.00
 ATOM
        1005
              C2
                 CYT
                                  -7.948 -22.355
                                                  11.182
                                                          1.00
                                                                 0.00
                          88
        1006
              02
                  CYT
                          88
                                  -9.022 -21.864
                                                  11.517 1.00
                                                                 0.00
 ATOM
              C3' CYT
                                  -7.323 -24.085
 ATOM
        1007
                          88
                                                  15.571
                                                           1.00
                                                                 0.00
        1008
              C2' CYT
                                  -7.846 -24.067
                                                  14.138
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
                          88
 ATOM
        1009
              03' CYT
                          88
                                  -8.349 -23.870
                                                  16.530
                                                          1.00
                                                                 0.00
 ATOM
        1010
              P
                  CYT
                          89
                                  -9.534 -24.941 16.793 1.00 0.00
```

```
111
                                                                   112
                                                         1.00 0.00
       1011 OP1 CYT
                                 -9.077 -26.267 16.323
ATOM
                         89
       1012 OP2 CYT
                                 -9.996 -24.775
                                                 18.189
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
                         89
       1013 05' CYT
                                -10.724 -24.457
                                                 15.812 1.00
ATOM
                         89
                                                                0.00
                                                          1.00
ATOM
       1014 C5' CYT
                         89
                                -11.459 -23.270
                                                 16.060
                                                                0.00
ATOM
       1015 C4' CYT
                         89
                                -12.556 -23.082 15.003
                                                         1.00
                                                                0.00
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1016 04'
                 CYT
                         89
                                -11.969 -22.984
                                                  13.719
ATOM
       1017 C1'
                 CYT
                         89
                                -12.742 -23.679
                                                  12.762 1.00
                                                                0.00
                                                          1.00
ATOM
       1018 N1
                 CYT
                         89
                                -11.824 -24.203 11.719
                                                                0.00
ATOM
       1019 C6
                 CYT
                         89
                                -10.690 -24.867
                                                 12.110
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
       1020 C5
                 CYT
                         89
                                 -9.767 -25.287
                                                  11.224
                                                          1.00
                                                                0.00
                 CYT
                                -10.028 -25.012
ATOM
       1021 C4
                         89
                                                   9.844
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1022 N4
                 CYT
                         89
                                 -9.151 -25.386
                                                   8.916
                                                          1.00
                                                                0.00
             N3
ATOM
       1023
                 CYT
                         89
                                -11.158 -24.402
                                                   9.454
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1024 C2
                CYT
                         89
                                -12.088 -23.994
                                                  10.366
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 CYT
ATOM
       1025
             02
                         89
                                -13.129 -23.463
                                                   9.983
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1026
             C3'
                 CYT
                         89
                                -13.544 -24.258
                                                  14.951
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1027 C2' CYT
                         89
                                -13.340 -24.833
                                                  13.556
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1028
             03' CYT
                         89
                                -14.868 -23.791
                                                  15.167
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1029
             P
                 THY
                         90
                                -16.152 -24.779
                                                  15.197
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1030
             OP1 THY
                         90
                                -17.145 -24.214
                                                  16.137
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OP2 THY
ATOM
       1031
                         90
                                -15.674 -26.167
                                                  15.377
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1032
             05' THY
                         90
                                -16.746 -24.653
                                                  13.702
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C5'
                 THY
ATOM
       1033
                         90
                                -17.310 -23.441
                                                  13.234
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1034
             C4'
                 THY
                         90
                                -17.678 -23.557
                                                  11.751
                                                          1.00
                                                                 0.00
             04'
                 THY
ATOM
       1035
                         90
                                -16.531 -23.968
                                                  11.029
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1036
             C1'
                 THY
                         90
                                -16.874 - 24.960
                                                  10.087
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1037
             N1
                 THY
                                -15.673 -25.808
                                                   9.863
                         90
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1038
             С6
                 THY
                         90
                                -15.115 -26.493
                                                  10.916
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C5
                 THY
ATOM
       1039
                         90
                                -13.946 -27.160
                                                  10.785
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1040
             C7
                 THY
                         90
                                -13.455 -27.923
                                                  12.002
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1041
             C4
                 THY
                                -13.212 -27.154
                                                   9.542
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         90
             04
                 THY
                                -12.118 -27.681
ATOM
       1042
                         90
                                                   9.370
                                                          1.00
                                                                 0.00
       1043
             N3
                 THY
                                -13.848 -26.473
                                                          1.00
ATOM
                         90
                                                   8.511
                                                                 0.00
             C2
                 THY
ATOM
       1044
                         90
                                -15.068 -25.819
                                                   8.604
                                                          1.00
                                                                 0.00
             02
                 THY
                                 -15.569 -25.301
ATOM
       1045
                         90
                                                   7.609
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1046
              C3'
                 THY
                                 -18.778 -24.594
                                                          1.00
                         90
                                                  11.468
                                                                 0.00
ATOM
       1047
              C2'
                 THY
                                 -18.018 -25.719
                                                  10.765
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         90
              03'
                 THY
ATOM
       1048
                         90
                                 -19.778 -24.006
                                                  10.651
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1049
             P
                  ADE
                         91
                                 -21.167 -24.760
                                                  10.301
                                                          1.00
                                                                 0.00
        1050
ATOM
              OP1 ADE
                                 -22.155 -23.738
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         91
                                                   9.891
ATOM
        1051
              OP2 ADE
                         91
                                 -21.490 -25.692
                                                  11.404
                                                          1.00
                                                                 0.00
        1052
              05'
                 ADE
                                 -20.781 -25.631
                                                                 0.00
ATOM
                         91
                                                    9.005
                                                          1.00
ATOM
        1053
              C5' ADE
                         91
                                 -20.640 -25.028
                                                   7.733
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1054
              C4'
                  ADE
                                 -20.013 -26.008
                                                    6.739
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         91
ATOM
              04'
                  ADE
                                 -18.719 -26.396
                                                          1.00
                                                                 0.00
        1055
                         91
                                                   7.143
ATOM
        1056
              C1'
                  ADE
                                 -18.389 -27.540
                                                    6.392
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         91
              N9
                  ADE
                                 -17.233 -28.225
                                                                 0.00
ATOM
        1057
                         91
                                                    6.996
                                                           1.00
ATOM
        1058
              С8
                  ADE
                         91
                                 -17.036 - 28.542
                                                    8.314
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  ADE
                                 -15.863 -29.055
ATOM
        1059
              N7
                                                    8.571
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         91
ATOM
        1060
             C5
                 ADE
                          91
                                 -15.255 -29.112
                                                    7.320
                                                          1.00 0.00
```

```
113
                                                                   114
                                                  6.881 1.00 0.00
ATOM
       1061 C6
                 ADE
                                -13.990 -29.549
                        91
                                                   7.717 1.00
                                                                0.00
                 ADE
                         91
                                -13.043 - 29.986
       1062
             N6
ATOM
                 ADE
                                -13.726 -29.533
                                                   5.560
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1063
             N1
                         91
                                                                0.00
                 ADE
                         91
                                -14.659 -29.093
                                                         1.00
ATOM
       1064
             C2
                                                   4.719
ATOM
       1065
             N3
                 ADE
                         91
                                -15.860 -28.609
                                                   5.009
                                                         1.00
                                                                0.00
                                                               0.00
             C4
                 ADE
                         91
                                -16.102 -28.648
                                                   6.346
                                                         1.00
ATOM
       1066
                 ADE
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
       1067
             C3'
                         91
                                -20.778 -27.331
                                                   6.575
             C2'
                 ADE
                                -19.656 -28.374
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1068
                         91
                                                   6.520
             03'
                 ADE
                                -21.564 -27.252
                                                   5.396
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1069
                         91
       1070 P
                  ADE
                                -22.432 -28.490
                                                   4.823
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
                         92
             OP1 ADE
                                -23.516 -27.941
                                                   3.979
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1071
                         92
             OP2 ADE
                                -22.758 -29.401
                                                   5.942
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
       1072
                         92
             05' ADE
                                -21.378 -29.235
                                                   3.856
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1073
                         92
       1074 C5' ADE
                         92
                                -20.840 -28.580
                                                   2.721
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
ATOM
       1075
             C4'
                 ADE
                         92
                                -19.710 -29.409
                                                   2.103
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1076
             04'
                 ADE
                         92
                                -18.695 -29.642
                                                   3.067
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1077
             C1'
                 ADE
                         92
                                -18.214 -30.959
                                                   2.916
                                                          1.00
                                                                 0.00
       1078
             N9
                  ADE
                         92
                                -17.555 -31.418
                                                   4.158
                                                         1.00
                                                                 0.00
ATOM
                                                                 0.00
ATOM
       1079
             68
                  ADE
                         92
                                -18.067 -31.455
                                                   5.431
                                                          1.00
                                -17.225 -31.855
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1080
             N7
                  ADE
                         92
                                                   6.344
                                -16.072 -32.120
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1081
             C5
                  ADE
                         92
                                                   5.618
                  ADE
                                -14.797 -32.590
                                                   5.988
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1082
             C6
                         92
ATOM
       1083
             N6
                  ADE
                         92
                                -14.471 - 32.840
                                                   7.257
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              N1
                  ADE
                                -13.874 -32.780
                                                   5.028
                                                          1.00
                                                                 0.00
       1084
                         92
ATOM
        1085
              C2
                  ADE
                         92
                                -14.197 -32.509
                                                   3.767
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1086
              N3
                  ADE
                         92
                                -15.351 -32.053
                                                   3.291
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                                 0.00
ATOM
        1087
              C4
                  ADE
                         92
                                 -16.263 -31.873
                                                   4.282
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1088
              C3'
                  ADE
                         92
                                 -20.164 -30.796
                                                   1.615
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1089
              C2' ADE
                         92
                                 -19.508 -31.720
                                                   2.643
                                                          1.00
              03'
                  ADE
                                 -19.672 -30.996
                                                   0.299
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1090
                         92
                                 -20.045 -32.299
ATOM
        1091
              P
                  CYT
                         93
                                                  -0.580
                                                          1.00
                                                                 0.00
              OP1 CYT
                                 -20.282 -31.870
                                                  -1.975
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1092
                         93
              OP2 CYT
                                 -21.077 -33.081
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1093
                         93
                                                   0.137
              05' CYT
                                 -18.672 -33.136
                                                  -0.538
                                                          1.00
                                                                 0.00
        1094
                          93
 ATOM
                                                          1.00
        1095
              C5' CYT
                                 -17.541 - 32.731
                                                  -1.288
                                                                 0.00
 ATOM
                          93
                                 -16.372 -33.677
                                                  -1.002 1.00
                                                                 0.00
 ATOM
        1096
              C4' CYT
                         93
        1097
              04' CYT
                         93
                                 -16.110 -33.667
                                                    0.383 1.00
                                                                 0.00
 ATOM
 ATOM
        1098
              C1' CYT
                          93
                                 -15.568 -34.909
                                                    0.767
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                    2.209
                                                          1.00
                                                                 0.00
 ATOM
        1099
              N1 CYT
                          93
                                 -15.847 -35.123
 ATOM
        1100
              60
                  CYT
                          93
                                 -17.079 -34.800
                                                    2.723
                                                          1.00
                                                                 0.00
              C5
                  CYT
                                 -17.354 -34.928
                                                    4.038
                                                          1.00
                                                                 0.00
 ATOM
        1101
                          93
 ATOM
        1102
              C4
                  CYT
                          93
                                 -16.293 -35.408
                                                    4.877
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                    6.202
                                                          1.00
 ATOM
        1103
              N4
                  CYT
                          93
                                 -16.443 - 35.460
                                                                 0.00
ATOM
        1104
              N3
                  CYT
                          93
                                 -15.104 - 35.755
                                                    4.365
                                                          1.00
                                                                 0.00
        1105
              C2
                  CYT
                          93
                                 -14.849 -35.638
                                                    3.033
                                                          1.00
                                                                 0.00
 ATOM
              02
                  CYT
                          93
                                 -13.758 -35.984
                                                    2.586
                                                          1.00
                                                                 0.00
 ATOM
        1106
              C3' CYT
                                                  -1.348
                                                           1.00
 ATOM
        1107
                          93
                                 -16.686 -35.139
                                                                 0.00
              C2' CYT
                          93
                                 -16.341 -35.919
                                                  -0.082
                                                          1.00
                                                                 0.00
 ATOM
        1108
              03' CYT
 ATOM
        1109
                          93
                                 -15.893 -35.581 -2.429 1.00
                                                                0.00
 END
```

116

115

HEADER 000000

REMARK 0.00000		0.00	528	1.60260	0.02450	0.01	756 2.	22544	1.683	74
REMARK		2.54	968	0.25168	0.39906	1.17	828 0.	72066		
REMARK		0.00	933	0.00454	0.00474	0.01	708 0.	00833		
REMARK			124	123	1		0	0		0
CEMARK 0			124	123	1		U	U		U
REMARK		1	378	305	460		273	340		
REMARK		0.03	3109	0.16086	0.02607	0.04	416 0.	08832	0.160	86
REMARK		6.40	0068	0.30700						
REMARK			4	2	2		0	0		0
0										
ATOM	1	N	GLU	1	5.831 -		34.866	1.00	0.00	
ATOM	2	CA	GLU	1	5.020 -		34.570	1.00	0.00	
ATOM	3	CB	GLU	1	5.369 -		35.516	1.00	0.00	
ATOM	4	CG	GLU	1	5.556 -		36.978		0.00	
ATOM	5	CD	GLU	1	4.425 -		37.458		0.00	
ATOM	6	OE1		1	3.428 -		37.972		0.00	
ATOM	7	0E2		1	4.574 -		37.246	1.00	0.00	
ATOM	8	C	GLU	1	5.180 -		33.103	1.00	0.00	
ATOM	9	0	GLU	1	5.866 -		32.353	1.00	0.00	
ATOM	10	N CA	LYS	2	4.548 -		32.705	1.00	0.00	
ATOM	11 12	CA CB	LYS LYS	2 . 2	4.596 -		31.356	1.00	0.00	
ATOM ATOM	13	CG	LYS	2	3.346 - 3.269 -		30.561 30.320	1.00	0.00	
ATOM	14	CD	LYS	2	2.086 -		29.402	1.00	0.00	
ATOM	15	CE	LYS	2	2.003 -				0.00	
ATOM	16	NZ	LYS	2	0.873 -			1.00	0.00	
ATOM	17	C	LYS	2	4.692 -		31.459	1.00	0.00	
ATOM	18	0	LYS	2	4.172 -		32.406	1.00	0.00	
ATOM	19	N	HIS	3	5.358 -		30.485	1.00	0.00	
ATOM	20	CA	HIS	3	5.553 -		30.420	1.00	0.00	
ATOM	21	СВ	HIS	3	6.719 -		31.337	1.00	0.00	
ATOM	22	CG	HIS	3	7.992 -		31.072	1.00	0.00	
ATOM	23		HIS	3	8.809 -		29.987	1.00	0.00	
ATOM	24		HIS	3	9.845 -		30.040	1.00	0.00	
ATOM	25		HIS	3	9.778 -	-22.575	31.084	1.00	0.00	
ATOM	26		HIS	3	8.604 -		31.734	1.00	0.00	
ATOM	27	C	HIS	3	5.763 -	-20.395	28.958	1.00	0.00	
ATOM	28	0	HIS	3	6.690 -	19.658	28.625	1.00	0.00	
ATOM	29	N	ARG	4	4.889 -	-20.899	28.080	1.00	0.00	
ATOM	30	CA	ARG	4	4.911 -	-20.647	26.649	1.00	0.00	
ATOM	31	CB	ARG	4	6.029 -	-21.480	26.001	1.00	0.00	
ATOM	32	CG	ARG	4	6.204 -	-21.174	24.506	1.00	0.00	

	117			,				118
ATOM	33	CD	ARG	4	7.400 -21.938	23.929	1.00	0.00
ATOM	34	NE	ARG	4	8.670 -21.478	24.514	1.00	0.00
ATOM	35	CZ	ARG	4	9.857 -22.093	24.375	1.00	0.00
ATOM	36	NH1	ARG	4	9.960 -23.218	23.655	1.00	0.00
ATOM	37	NH2	ARG	4	10.945 -21.576	24.961	1.00	0.00
ATOM	38	C	ARG	4	3.535 -21.012	26.092	1.00	0.00
ATOM	39	0	ARG	4	2.904 -21.949	26.581	1.00	0.00
ATOM	40	N	ALA	5	3.079 -20.269	25.079	1.00	0.00
ATOM	41	CA	ALA	5	1.792 -20.469	24.425	1.00	0.00
ATOM	42	CB	ALA	5	0.682 -19.777	25.223	1.00	0.00
ATOM	43	C	ALA	5	1.877 -19.931	22.998	1.00	0.00
ATOM	44	0	ALA	5	1.649 -20.669	22.041	1.00	0.00
ATOM	45	N	ARG	6	2.221 -18.644	22.867	1.00	0.00
ATOM	46	CA	ARG	6	2.374 -17.978	21.582	1.00	0.00
ATOM	47	CB	ARG	6	2.741 -16.503	21.788	1.00	0.00
ATOM	48	CG	ARG	6	1.710 -15.759	22.649	1.00	0.00
ATOM	49	CD	ARG	6.	2.109 -14.288	22.819	1.00	0.00
ATOM	50	NE	ARG	6	2.024 -13.550	21.552	1.00	0.00
ATOM	51	CZ	ARG	6	0.895 -13.080	21.003	1.00	0.00
ATOM	52	NH1	ARG	6	-0.295 -13.314	21.571	1.00	0.00
ATOM	53	NH2	ARG	. 6	0.985 -12.387	19.867	1.00	0.00
ATOM	54	C	ARG	6	3.480 -18.696	20.809	1.00	0.00
ATOM	55	0	ARG	6	4.564 -18.909	21.356	1.00	0.00
ATOM	56	N	LYS		3.210 -19.092		1.00	0.00
ATOM	57	CA	LYS	7	4.169 -19.820	18.747	1.00	0.00
ATOM	58	CB	LYS	. 7	4.107 -21.304	19.154	1.00	0.00
ATOM	59	CG	1110	. 7	5.223 -22.187	18.578	1.00	0.00
ATOM <sup>*</sup>	60	CD	LYS	7	5.027 -22.689	17.139	1.00	0.00
ATOM	61	CE	LYS	7	3.745 -23.514	16.941	1.00	0.00
ATOM	62	NZ	LYS	7	2.640 -22.709	16.389	1.00	0.00
ATOM	63	C	LYS	7	3.851 -19.606	17.269	1.00	0.00
ATOM	64	0	LYS	7 -	2.778 -20.001	16.813	1.00	0.00
ATOM	65	N	ARG	8	4.790 -18.999	16.531	1.00	0.00
ATOM	66	CA	ARG	8	4.690 -18.730	15.103	1.00	0.00
ATOM	67	CB	ARG	8	4.565 -17.219	14.863	1.00	0.00
ATOM	68	CG	ARG	8	4.288 -16.918	13.381	1.00	0.00
ATOM	69	CD	ARG	8	2.886 -16.349	13.131	1.00	0.00
ATOM	70	NE	ARG	8	1.814 -17.221	13.637	1.00	0.00
ATOM	71	CZ	ARG	8	0.509 -16.902	13.593	1.00	0.00
ATOM	72	NH1	ARG	8	0.105 -15.774	13.005	1.00	0.00
ATOM	73	NH2	2 ARG	8	-0.411 -17.690	14.159	1.00	0.00
ATOM	74	C	ARG	8	5.922 -19.340	14.427	1.00	0.00
ATOM	75	0	ARG	8	6.952 -18.689	14.272	1.00	0.00
ATOM	76	N	GLN	9	5.804 -20.610	14.036	1.00	0.00
ATOM	77	CA	GLN	9	6.837 -21.396	13.391	1.00	0.00
ATOM	78	CB	GLN	9	6.522 -22.881	13.601	1.00	0.00
ATOM	79	CG	GLN	9	7.652 -23.792	13.114	1.00	0.00
ATOM	80	CD	GLN	9	7.189 -25.242	13.124	1.00	0.00
ATOM	. 81	0E1	GLN	9	6.749 -25.753	12.099	1.00	0.00
ATOM	82	NE	2 GLN	9	7.279 -25.910	14.273	1.00	0.00

119 С GLN 9 6.920 -21.037 11.908 1.00 0.00 ATOM 83 **ATOM** 84 0 GLN 9 6.339 -21.722 11.061 1.00 N ALA 10 7.662 -19.968 11.601 1.00 ATOM 85 ATOM 86 CA ALA 10 7.878 -19.511 10.236 1.00 0.00 CB ALA 10 8.831 -18.313 10.236 1.00 0.00 ATOM 87 ATOM 88 C ALA 10 8.437 -20.664 9.398 1.00 0.000 ALA 9.244 -21.457 9.884 1.00 ATOM 89 10 0.00 ATOM 90 N TRP 11 7.986 -20.768 8.146 1.00 0.00 ATOM CA TRP 11 8.400 -21.837 7.254 1.00 0.00 91 ATOM 92 CB TRP 11 7.459 -21.900 6.051 1.00 0.00 ATOM CG TRP 6.122 -22.522 6.328 1.00 93 11 0.00ATOM CD1 TRP 11 5.224 -22.126 7.259 1.00 0.00 94 0.00 **ATOM** NE1 TRP 4.113 -22.944 7.225 1.00 95 11 **ATOM** 96 CE2 TRP 11 4.242 -23.917 6.256 1.00 0.00 ATOM CZ2 TRP 3.414 -24.966 5.827 1.00 0.00 97 11 ATOM CH2 TRP 3.844 -25.798 4.788 1.00 0.00 98 11 **ATOM** 99 CZ3 TRP 5.092 -25.576 4.183 1.00 0.00 11 ATOM 100 CE3 TRP 11 5.915 -24.523 4.615 1.00 0.00 CD2 TRP 5.516 -23.668 ATOM 101 11 5.664 1.00 0.00ATOM 102 С TRP 11 9.868 -21.710 6.846 1.00 0.00 ATOM 103 0 TRP 10.400 -20.607 6.735 1.00 0.00 11 ATOM 104 N LEU 12 10.506 -22.867 6.640 1.00 0.00 LEU 12 ATOM 105 CA 11.909 -23.000 6.264 1.00 0.00 ATOM 106 CB LEU 12 12.564 -24.075 7.144 1.00 0.00 CG LEU ATOM 107 12 12.354 -23.876 8.656 1.00 0.00 ATOM 108 CD1 LEU 12 13.010 -25.041 9.406 1.00 0.00 CD2 LEU 0.00 ATOM 109 12 12.943 -22.548 9.146 1.00 C LEU **ATOM** 110 12 12.024 -23.386 4.786 1.00 0.00 **ATOM** 0 LEU 12 -11.022 -23.740 4.163 1.00 0.00 111 TRP ATOM 112 N 13 --13.247 -23.334 4.227 1.00 0.00 TRP 13.471 -23.697 ATOM 113 CA13 2.828 1.00 0.00 1.00 ATOM CBTRP 14.940 -23.739 2.386 0.00 114 13 ATOM 115 CG TRP 13 15.855 -22.945 3.216 1.00 0.00 CD1 TRP 16.076 -21.647 ATOM 116 13 3.020 1.00 0.00 ATOM NE1 TRP 16.977 -21.181 3.961 1.00 117 13 0.00 ATOM 118 CE2 TRP 13 17.368 -22.205 4.814 1.00 0.00 ATOM 119 CZ2 TRP 13 18.236 -22.277 5.913 1.00 0.00 CH2 TRP ATOM 120 13 18.406 -23.507 6.573 1.00 0.00ATOM 121 CZ3 TRP 13 17.710 -24.649 6.130 1.00 0.00 16.843 -24.569 ATOM CE3 TRP 13 5.026 1.00 0.00 122 CD2 TRP ATOM 123 13 16.656 -23.348 4.350 1.00 0.00 ATOM C TRP 12.944 -25.086 1.00 0.00 124 13 2.616 0 ATOM 125 TRP 13 12.052 -25.268 1.818 1.00 0.00 N GLU 14 13.518 -26.047 ATOM 126 3.334 1.00 0.00 ATOM 127 CA GLU 13.152 -27.449 1.00 0.0014 3.240 **ATOM** CBGLU 13.779 -28.241 4.394 1.00 0.00 128 14 ATOM 129 CG GLU 14 13.378 -27.725 5.782 1.00 0.00 ATOM 130 CDGLU 14 14.239 -28.367 6.863 1.00 0.00 OE1 GLU 14.095 -29.595 ATOM 7.047 1.00 0.00 131 14 **ATOM** 132 OE2 GLU 15.042 -27.621 7.464 1.00 0.00 14

	121				(02)		,		122	100
ATOM	133	С	GLU	14	11 6/1	-27.636	3.095	1.00	122 0.00	
ATOM	134	0	GLU	14		-28.382	2.224	1.00	0.00	
ATOM	135	N	GLU	15		-26.933	3.903	1.00	0.00	
ATOM	136	CA	GLÜ			-26.994	3.820	1.00	0.00	
ATOM	137	CB	GLU	15		-26.273	5.024	1.00	0.00	
ATOM	138	CG	GLU	15		-26.871	6.344	1.00	0.00	
ATOM	139	CD	GLU	15		-26.448			0.00	
ATOM	140		GLU	15		-25.239	7.501 7.821	1.00		
ATOM	141		GLU	15		-27.332			0.00	
ATOM	141	C	GLU	15		-26.442	8.031 2.473	1.00	0.00	
ATOM	143	0	GLU	15		-27.168	1.720	1.00	0.00	
ATOM	143	N	ASP	16		-25.175	2.152	1.00	0.00	
ATOM	145	CA	ASP	16		-24.536	0.891	1.00	0.00	
ATOM	145	CB	ASP	16		-23.145	0.788	1.00	0.00	
ATOM	147	CG	ASP	16		-22.078	1.491	1.00	0.00	
ATOM	148		ASP	16		-21.473	0.804	1.00	0.00	
			ASP	16				1.00	0.00	
ATOM Atom	149 150	C	ASP	16		-21.883 -25.377	2.708 -0.315	1.00	0.00	
ATOM	151	0	ASP	16		-25.775		1.00	0.00	
ATOM ·	151	N	LYS	17		-25.632	-1.145	1.00	0.00	
ATOM	153		LYS	17		-26.395		1.00	0.00	
ATOM	154	CB	LYS	17		-26.500		1.00	0.00	
ATOM	155	CG	LYS	17		-27.273		1.00	0.00	
ATOM	156	CD	LYS	17		-27.457	-1.001	1.00	0.00	
ATOM	157	CE	LYS	17		-28.279	-1.862	1.00	0.00	•
ATOM	158	NZ	LYS	17		-28.525	-1.162	1.00	0.00	
ATOM	159	C	LYS	17		-27.747	-1.591	1.00	0.00	
ATOM	160	0	LYS	17		-28.094	-2.738	1.00	0.00	
ATOM	161	N	ASN	18		-28.504		1.00	0.00	
ATOM	162	CA	ASN	18		-29.806		1.00	0.00	
ATOM	163	CB	ASN	18		-30.491	0.773	1.00	0.00	
ATOM	164	CG	ASN	18		-31.061		1.00	0.00	
ATOM	165	0D1	ASN	18		-30.952	0.467	1.00	0.00	
ATOM	166	ND2	ASN	18	11.081	-31.693	2.361	1.00	0.00	
ATOM	167	С	ASN	18	8.270	-29.688	-1.130	1.00	0.00	
ATOM	168	0	ASN	18	7.907	-30.418	-2.051	1.00	0.00	
ATOM	169	N	LEU	19	7.465	-28.784	-0.557	1.00	0.00	
ATOM	170	CA	LEU	19	6.082	-28.567	-0.965	1.00	0.00	
ATOM	171	CB	LEU	19	5.475	-27.427	-0.132	1.00	0.00	
ATOM	172	CG	LEU	19	4.044	-27.040	-0.528	1.00	0.00	
MOTA	173	CD1	LEU	19	3.067	-28.215	-0.419	1.00	0.00	
ATOM	174	CD2	LEU	19	3.568	-25.885	0.364	1.00	0.00	
ATOM	175	C	LEU	19	6.023	-28.277	-2.463	1.00	0.00	
ATOM	176	0	LEU	19		-28.901	-3.188	1.00	0.00	
ATOM	177	N	ARG	20		-27.337	-2.918	1.00	0.00	
ATOM	178	CA	ARG	20		-26.939	-4.308	1.00	0.00	
ATOM	179	CB	ARG	20		-25.836	-4.435	1.00	0.00	
ATOM	180	CG	ARG	20		-25.312	-5.871	1.00	0.00	
ATOM	181	CD	ARG	20		-24.087		1.00	0.00	
ATOM	182	NE	ARG	20	10.403	-24.414	-5.441	1.00	0.00	

```
123
                                                                   124
ATOM
        183 CZ ARG
                         20
                                 11.339 -23.514 -5.100 1.00 0.00
             NH1 ARG
ATOM
        184
                         20
                                 11.098 -22.202 -5.223
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             NH2 ARG
                         20
                                 12.523 -23.933
                                                 -4.635
                                                          1.00
                                                                0.00
        185
ATOM
        186
             С
                  ARG
                         20
                                  7.265 -28.152
                                                 -5.180
                                                          1.00
                                                                 0.00
        187
             0
                  ARG
                                  6.566 -28.384
                                                 -6.161
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
                         20
                  SER
                                  8.292 -28.930
                                                  -4.821
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        188
             N
                         21
ATOM
        189
             CA
                  SER
                         21
                                  8.663 -30.125
                                                 -5.570
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CB
                  SER
                         21
                                  9.865 -30.803
                                                 -4.902
                                                          1.00
ATOM
        190
                                                                 0.00
             0G
                  SER
                                 10.957 -29.911 -4.825
ATOM
        191
                         21
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        192
             C
                  SER
                         21
                                  7.476 -31.091
                                                  -5.675
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        193
             0
                  SER
                         21
                                  7.145 -31.563
                                                  -6.764
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        194
             N
                  GLY
                         22
                                   6.839 - 31.382
                                                  -4.538
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  GLY.
ATOM
        195
             CA
                         22
                                   5.701 -32.277
                                                  -4.446
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C
                  GLY.
ATOM
         196
                         22
                                   4.556 -31.846
                                                  -5.356
                                                          1.00
                                                                 0.00
             0
                  GLY-
                         22
ATOM
         197
                                   4.134 -32.624
                                                  -6.208
                                                           1.00
                                                                 0.00
             N
                  VAL
                                   4.056 - 30.618
                                                  -5.186
ATOM
         198
                         23
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  VAL
ATOM
        199
              CA
                         23 -
                                   2.958 -30.117 -6.000
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CB
                 VAL
ATOM
        200
                         23
                                   2.446 -28.757
                                                  -5.499
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CG1 VAL
                                   1.310 -28.266
                                                  -6.407
                                                                 0.00
         201
                         23
                                                           1.00
ATOM
        202
              CG2 VAL
                         23
                                   1.897 -28.860
                                                  -4.070
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         203
             C
                  VAL
                                   3.350 -30.066
                                                  -7.476
                         23
                                                           1.00
                                                                 0.00
             0
                  VAL
ATOM
         204
                         23
                                   2.549 -30.433
                                                  -8.330
                                                           1.00
                                                                 0.00
             N
                  ARG
                                   4.570 -29.624
                                                  -7.796
ATOM
         205
                         24
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CA
                  ARG
                         24
                                   5.022 -29.544
                                                  -9.179
                                                           1.00
                                                                 0.00
         206
                                   6.443 -28.960 -9.236
ATOM
         207
              CB
                  ARG
                         24
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CG
ATOM
         208
                  ARG
                         24
                                   6.918 -28.614 -10.655
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CD
                  ARG
ATOM
         209
                                   6.077 -27.484 -11.263
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         24
              NE
                  ARG
ATOM
                         24
                                   6.691 -26.941 -12.483
                                                           1.00
                                                                 0.00
         210
ATOM
              CZ ARG
                                   6.269 -25.825 -13.101
         211
                         24
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         212
              NH1 ARG
                         24
                                   5.213 -25.154 -12.624
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         213
              NH2 ARG
                                   6.903 -25.378 -14.193
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         24
ATOM
              C
                  ARG
                                   4.951 -30.913 -9.863
                                                                 0.00
         214
                         24
                                                           1.00
ATOM
         215
              0
                  ARG
                          24
                                   4.565 -30.999 -11.026
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         216
              N
                  LYS
                          25
                                   5.328 -31.978
                                                  -9.144
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         217
              CA
                  LYS
                          25
                                   5.328 -33.335
                                                  -9.673
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         218
              CB
                  LYS
                          25
                                   6.279 - 34.202
                                                  -8.839
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CG
ATOM
         219
                 LYS
                          25
                                   7.748 - 33.801
                                                  -9.022
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  LYS
                                   8.597 -34.563
ATOM
         220
              CD
                          25
                                                  -8.000
                                                           1.00
                                                                 0.00
         221
              CE LYS
                          25
                                  10.044 -34.057
                                                  -7.983
                                                                 0.00
ATOM
                                                           1.00
              NZ LYS
                                  10.828 -34.707
ATOM
         222
                          25
                                                  -6.915
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C
                  LYS
                                   3.942 -33.992
                                                  -9.703
ATOM
         223
                          25
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         224
              0
                  LYS
                                   3.543 -34.531 -10.732
                          25
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  TYR
ATOM
         225
              N
                          26
                                   3.238 -34.001
                                                  -8.566
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         226
              CA TYR
                          26
                                   1.961 -34.694
                                                   -8.396
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CB
                  TYR
                                   1.884 -35.248
                                                   -6.962
         227
                          26
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         228
              CG
                  TYR
                          26
                                   3.180 -35.770
                                                   -6.363
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         229
              CD1 TYR
                          26
                                   4.111 -36.486
                                                   -7.140
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         230
              CE1 TYR
                          26
                                   5.307 -36.944
                                                   -6.562
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
              CZ TYR
                                   5.576 -36.691
                                                                 0.00
         231
                          26
                                                   -5.206
                                                           1.00
 ATOM
         232
              OH TYR
                                   6.738 -37.136 -4.645 1.00 0.00
                          26
```

	105				(01)	•			100
ATOM	125 233	CE2	TVD	26	4 647	-35.981	_4 427	1.00	126 0.00
ATOM	234	CD2		26		-35.521	-5.007	1.00	0.00
ATOM	235	CDZ	TYR	26		-33.848	-8.653	1.00	0.00
ATOM	236	0	TYR	26		-34.382	-9.076	1.00	0.00
ATOM	237	N	GLY	20 27		-32.547	-8.363	1.00	0.00
ATOM	238	CA	GLY	27		-31.615	-8.478	1.00	0.00
ATOM	239	C	GLY	27		-31.316	-7.073	1.00	0.00
			GLY						
ATOM	240	0 N		27		-31.651	-6.086	1.00	0.00
ATOM	241	N	GLU	28		-30.689	-6.972	1.00	0.00
ATOM	242	CA	GLU	28			-5.701	1.00	0.00
ATOM	243	CB	GLU	28			-5.833	1.00	0.00
ATOM	244	CC	GLU	28			-6.085	1.00	0.00
ATOM	245	CD	GLU	28			-6.175	1.00	0.00
ATOM	246		GLU	28			-6.974	1.00	0.00
ATOM	247 248	C	GLU GLU	28 28			-5.423 -5.280	1.00	0.00 0.00
ATOM		0		28 28					0.00
ATOM Atom	249 250	N	GLU GLY	20 29		-32.481 -31.299	-5.969 -4.143	1.00	0.00
ATOM	251	CA	GLY	29 29			-3.631	1.00	0.00
ATOM	252	CA	GLY	29 29			-3.262	1.00	0.00
ATOM	253	0	GLY	29 29		-34.668		1.00	0.00
ATOM	254	N	ASN	30			-2.697	1.00	0.00
ATOM	255	CA	ASN	30			-2.243	1.00	0.00
ATOM	256	CB	ASN	30			-3.420	1.00	0.00
ATOM	257	CG	ASN	30		-34.825	-4.215	1.00	0.00
ATOM	258		ASN	30			-4.060	1.00	0.00
ATOM	259		ASN	30			-5.090	1.00	0.00
ATOM	260	C	ASN	30		-34.274	-1.242	1.00	0.00
ATOM	261	0	ASN	30		-34.723	-1.252	1.00	0.00
ATOM	262	N	TRP	31			-0.369	1.00	0.00
ATOM	263	CA	TRP	31		-32.731		1.00	0.00
ATOM	264	СВ	TRP	31		-31.636	1.358	1.00	0.00
ATOM	265	CG	TRP	31		-30.798	0.424	1.00	0.00
ATOM	266		TRP	31		-30.936	0.212	1.00	0.00
ATOM	267		TRP	31		-30.018	-0.723	1.00	0.00
ATOM	268		TRP	31	-3.475	-29.233	-1.161	1.00	0.00
ATOM	269	CZ2	TRP	31	-3.396	-28.181	-2.083	1.00	0.00
ATOM	270	CH2	TRP	31	-2.155	-27.570	-2.313	1.00	0.00
ATOM	271	CZ3	TRP	31	-1.013	-28.016	-1.629	1.00	0.00
ATOM	272	CE3	TRP	31	-1.104	-29.076	-0.706	1.00	0.00
ATOM	273	CD2	TRP	31	-2.338	-29.709	-0.445	1.00	0.00
ATOM	274	C	TRP	31	-0.595	-33.787	1.595	1.00	0.00
ATOM	275	0	TRP	31	0.603	-33.794	1.867	1.00	0.00
ATOM	276	N	SER	32	-1.451	-34.696	2.071	1.00	0.00
ATOM	277	CA	SER	32	-1.041	-35.796	2.934	1.00	0.00
ATOM	278	CB	SER	32	-2.255	-36.663	3.276	1.00	0.00
ATOM	279	OG	SER	32	-1.866	37.868	3.904	1.00	0.00
ATOM	280	C	SER	32	0.042	2 -36.617	2.228	1.00	0.00
ATOM	281	0	SER	32	1.055	-36.957	2.832	1.00	0.00
ATOM	282	N	LYS	33	-0.152	2 -36.926	0.940	1.00	0.00

```
127
                                                                   128
ATOM
        283
             CA LYS
                         33
                                  0.830 - 37.687
                                                   0.183 1.00 0.00
ATOM
        284
             CB
                 LYS
                         33
                                  0.338 - 38.008
                                                 -1.233
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 LYS
ATOM
        285
             CG
                         33
                                 -1.043 - 38.672 - 1.174
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        286
             CD
                 LYS
                         33
                                 -1.419 -39.317
                                                 -2.514
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             CE
                 LYS
                         33
                                 -2.937 -39.501
                                                  -2.642
        287
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                                 0.00
ATOM
        288
             NZ
                 LYS
                         33
                                 -3.514 -40.246
                                                  -1.506
                                                          1.00
ATOM
        289
             C
                  LYS
                         33
                                  2.161 -36.938
                                                   0.195
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        290
             0
                  LYS
                         33
                                  3.192 -37.528
                                                   0.491
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N
ATOM
        291
                  ILE
                         34
                                   2.152 -35.632
                                                  -0.086
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        292
             CA
                 ILE
                         34
                                   3.368 -34.829
                                                  -0.056
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             CB
                 ILE
                                   3.062 -33.396
        293
                         34
                                                  -0.541
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                  -0.323
ATOM
        294
             CG2 ILE
                         34
                                   4.255 -32.453
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CG1 ILE
                                   2.686 -33.437
                                                  -2.032
ATOM
        295
                         34
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        296
             CD1 ILE
                         34
                                   2.094 -32.123
                                                  -2.548
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             C
                  ILE
                                   4.002 -34.882
                                                           1.00
                                                                 0.00
        297
                         34
                                                   1.343
ATOM
        298
             0
                  ILE
                         34
                                   5.218 -35.012
                                                   1.453
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         299
             N
                  LEU
                         35
                                   3.193 -34.806
                                                    2.407
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                                 0.00
ATOM
         300
             CA
                 LEU
                         35
                                   3.644 -34.880
                                                    3.794
                                                          1.00
ATOM
         301
             CB
                  LEU
                         35
                                   2.453 -34.604
                                                    4.723
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         302
              CG
                 LEU
                         35
                                   2.769 -34.648
                                                    6.227
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CD1 LEU
ATOM
         303
                         35
                                   3.787 -33.574
                                                    6.628
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         304
              CD2 LEU
                         35
                                   1.457 -34.465
                                                    6.997 [1.00]
                                                                 0.00
ATOM
         305
             C
                  LEU
                                   4.289 -36.242
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         35
                                                    4.083
ATOM
             0
                  LEU
         306
                         35
                                   5.212 -36.337
                                                    4.891
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         307
              N
                  LEU
                                   3.816 -37.303
                                                    3.422
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         36
              CA
                  LEU
                                   4.356 -38.644
ATOM
         308
                          36
                                                    3.578 1.00
                                                                 0.00
                  LEU
ATOM
         309
              CB
                                   3.353 -39.697
                                                    3.062
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          36
ATOM
              CG
                  LEU
         310
                          36
                                   2.509 -40.318
                                                    4.188
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        311
              CD1 LEU
                          36
                                   1.600 -39.312
                                                    4.903
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CD2 LEU
ATOM
         312
                          36
                                   1.645 -41.449
                                                    3.618 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         313
             С
                  LEU
                          36
                                   5.686 -38.761
                                                    2.832
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         314
              0
                  LEU
                                   6.672 -39.234
                                                    3.396
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          36
ATOM
         315
              N
                  HIS
                          37
                                   5.701 -38.349
                                                    1.564
                                                           1.00
                                                                 0.00
             CA
                  HIS
ATOM
         316
                          37
                                   6.844 - 38.438
                                                    0.668
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         317
              CB HIS
                          37
                                   6.401 - 38.107
                                                   -0.767
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CG HIS
                                                                 0.00
ATOM
         318
                          37
                                   5.208 -38.897
                                                   -1.267
                                                           1.00
              ND1 HIS
ATOM
                          37
                                   4.701 -38.747
                                                   -2.548
         319
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CE1 HIS
                                   3.648 - 39.572
ATOM
         320
                          37
                                                  -2.662
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         321
             NE2 HIS
                          37
                                   3.407 -40.272
                                                  -1.557
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         322
              CD2 HIS
                          37
                                   4.395 -39.843
                                                   -0.683
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C
                  HIS
                                   8.011 -37.564
         323
                          37
                                                    1.132
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         324
              0
                  HIS
                          37
                                   9.127 -38.058
                                                    1.282
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  TYR
ATOM
         325
              N
                          38
                                   7.759 - 36.273
                                                    1.360
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         326
              CA TYR
                          38
                                   8.749 -35.305
                                                    1.806
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         327
              CB
                  TYR
                                   8.573 -33.991
                                                    1.050
                                                           1.00
                          38
                                                                  0.00
ATOM
         328
              CG TYR
                          38
                                   8.742 -34.050
                                                   -0.453
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CD1 TYR
ATOM
         329
                          38
                                   7.647 - 34.402
                                                   -1.261
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         330
              CE1 TYR
                          38
                                   7.793 -34.451
                                                   -2.655
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         331
              CZ
                  TYR
                          38
                                   9.029 -34.147
                                                   -3.247
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         332
              OH TYR
                          38
                                   9.156 -34.196
                                                 -4.604 1.00 0.00
```

					(00)			141111 7 0 0 3	1 3
	129							130	
ATOM	333	CE2		. 38	10.126 -33.795		1.00	0.00	
ATOM	334	CD2		38	9.982 -33.747	-1.046	1.00	0.00	
ATOM	335	C	TYR	38	8.557 -35.041	3.295	1.00	0.00	
ATOM	336	0	TYR	38	7.490 -35.310	3.838	1.00	0.00	
ATOM	337	N	LYS	39	9.584 -34.514	3.965	1.00	0.00	
ATOM	338	CA	LYS	39	9.522 -34.206	5.386	1.00	0.00	
ATOM	339	CB	LYS	39	10.812 -34.654	6.083	1.00	0.00	
ATOM	340	CG	LYS	39	11.132 -36.149	5.911	1.00	0.00	
ATOM	341	CD	LYS	39	10.010 -37.087	6.398	1.00	0.00	
ATOM	342	CE	LYS	39	9.238 -37.779	5.257	1.00	0.00	
ATOM	343	NZ	LYS	39	7.776 -37.599	5.358	1.00	0.00	
ATOM	344	C	LYS	39	9.267 -32.711	5.589	1.00	0.00	
ATOM	345	0	LYS	39	9.564 -31.901	4.712	1.00	0.00	
ATOM	346	N	PHE	40	8.712 -32.365	6.753	1.00	0.00	
ATOM	347	CA	PHE	40	8.390 -31.009	7.175	1.00	0.00	
ATOM	348	CB	PHE	40	6.962 -30.620	6.765	1.00	0.00	
ATOM	349	CG	PHE	40	6.652 -30.565		1.00	0.00	
ATOM	350		PHE	40	6.391 -31.732		1.00	0.00	
ATOM	351		PHE	40	6.100 -31.642		1.00	0.00	
ATOM	352		PHE	40	6.068 -30.387		1.00		
ATOM	353		PHE	40	6.328 -29.228		1.00		
ATOM	354		PHE	40	6.618 -29.316		1.00	0.00	
ATOM	355	C	PHE	40	8.494 -30.964		1.00	0.00	
ATOM	356	0	PHE	40	8.705 -32.000		1.00	0.00	
ATOM	357	N	ASN	41	8.322 -29.780		1.00	0.00	
ATOM	358	CA	ASN	41	8.367 -29.620		1.00	0.00	
ATOM	359	CB	ASN	41	8.318 -28.133		1.00	0.00	
ATOM	360	CG	ASN	41	9.527 -27.322		1.00	0.00	
ATOM	361		ASN	41	10.570 -27.868			0.00	
ATOM	362		ASN	41	9.383 -25.997		1.00		
ATOM	363	C	ASN	41	7.176 -30.358		1.00		
ATOM	364	0	ASN	41	7.350 -31.360		1.00		
ATOM	365	N	ASN	42	5.963 -29.849		1.00		
ATOM	366	CA	ASN	42	4.695 -30.385		1.00		
ATOM	367	CB	ASN	42	4.576 -30.219		1.00		
ATOM	368	CG	ASN	42	3.349 -30.934		1.00		
ATOM .			ASN	42	3.469 -32.009		1.00		
ATOM	370		ASN	42	2.164 -30.345		1.00		
ATOM	371	C	ASN	42	3.598 -29.634		1.00		
ATOM	372	0	ASN	42	2.922 -28.771		1.00		
ATOM	373	N	ARG	43	3.452 -29.944		1.00		
ATOM	374	CA	ARG	43	2.495 -29.301		1.00		
ATOM	375	CB	ARG	43	3.217 -28.802		1.00		
ATOM	376	CG	ARG	43	4.473 -27.983		1.00		
ATOM	377	CD	ARG	43	4.191 -26.789		1.00		
ATOM	378	NE	ARG	43	5.395 -25.965		1.00		
ATOM	379	CZ	ARG	43	5.440 -24.819		1.00		
ATOM	380		ARG	43	4.339 -24.412		1.00		
ATOM	381		ARG	43	6.564 -24.095				
ATOM	382	C	ARG	43	1.386 -30.280				
111 OH	302	•	11110	10	1.000 00.200	0.201	1.00	3.00	

```
131
                                                                   132
                                                   7.746 1.00 0.00
ATOM
        383
             0
                 ARG
                        43
                                  1.659 -31.347
ATOM
        384
             N
                 THR
                                  0.138 -29.906
                                                   8.572 1.00
                                                               0.00
                         44
ATOM
        385
             CA
                 THR
                                 -1.042 -30.700
                                                   8.282 1.00
                                                                0.00
                         44
ATOM
        386
             CB
                 THR
                         44
                                 -2.156 -30.272
                                                   9.249 1.00
                                                                0.00
ATOM
        387
             CG2 THR
                                 -1.763 -30.519
                                                  10.710 1.00
                                                                0.00
                         44
        388
ATOM
             OG1 THR
                                 -2.432 -28.896
                                                   9.062
                                                         1.00
                                                                0.00
                         44
ATOM
        389
             C
                 THR
                                 -1.499 -30.446
                                                   6.845 1.00
                                                                0.00
                         44
ATOM
        390
             0
                 THR
                         44
                                 -1.023 -29.519
                                                   6.188
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        391
             N
                 SER
                         45
                                 -2.456 -31.251
                                                   6.368 1.00
                                                                0.00
ATOM
        392
             \mathsf{CA}
                 SER
                         45
                                 -3.043 -31.079
                                                   5.045
                                                         1.00
                                                                0.00
                 SER
ATOM
        393
             CB
                         45
                                 -4.104 -32.165
                                                   4.816
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        394
             0G
                 SER
                         45
                                 -4.741 -32.023
                                                   3.562 1.00
                                                                0.00
ATOM
        395
             C
                  SER
                                 -3.606 - 29.651
                                                                0.00
                         45
                                                   4.954 1.00
ATOM
        396
             0
                  SER
                         45
                                 -3.460 -28.991
                                                   3.927
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        397
             N
                  VAL
                                 -4.214 -29.169
                                                   6.052 1.00
                                                                 0.00
                         46
ATOM
        398
             CA
                 VAL
                         46
                                 -4.755 -27.820
                                                   6.159
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        399
             CB
                 VAL
                         46
                                 -5.393 -27.572
                                                   7.543 1.00
                                                                0.00
ATOM
        400
             CG1 VAL
                         46
                                 -5.997 -26.163
                                                   7.612 1.00
                                                                0.00
ATOM
        401
             CG2 VAL
                         46
                                  -6.497 -28.575
                                                   7.881
                                                          1.00
                                                                0.00
             C
                  VAL
ATOM
        402
                         46
                                 -3.633 - 26.808
                                                   5.922
                                                          1.00
                                                                 0.00
             0
                  VAL
ATOM
        403
                         46
                                 -3.759 - 25.963
                                                   5.042 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         404
             N
                  MET
                         47
                                 -2.548 - 26.888
                                                   6.710
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  MET
ATOM
         405
             CA
                         47
                                  -1.409 -25.982
                                                   6.604
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         406
             CB
                 MET
                         47
                                  -0.282 - 26.448
                                                   7.537
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CG
                 MET
                                  -0.515 -26.105
                                                   9.007
                                                                 0.00
         407
                         47
                                                          1.00
              SD
ATOM
         408
                  MET
                         47
                                  -0.299 - 24.350
                                                   9.392 1.00
                                                                 0.00
                                                  11.192 1.00
ATOM
         409
             CE
                 MET
                                  -0.345 -24.452
                                                                 0.00
                         47
ATOM
                  MET
         410
             C
                         47
                                  -0.879 -25.915
                                                   5.172 1.00
                                                                 0.00
ATOM
             0
                  MET
                                  -0.772 -24.835
         411
                         47
                                                   4.596 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         412
             N
                  LEU
                                  -0.536 -27.078
                                                                 0.00
                         48
                                                   4.613 1.00
ATOM
         413
             CA LEU
                                  0.013 - 27.216
                                                   3.272 1.00
                                                                 0.00
                         48
ATOM
             CB
                  LEU
         414
                         48
                                  0.262 - 28.707
                                                   2.991 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         415
              CG
                 LEU
                         48
                                   1.368 -29.293
                                                   3.889
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         416
             CD1 LEU
                         48
                                   1.179 -30.795
                                                   4.108 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         417
             CD2 LEU
                         48
                                   2.761 -29.092
                                                   3.285 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         418
             С
                  LEU
                         48
                                  -0.911 - 26.573
                                                   2.229
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         419
             0
                  LEU
                         48
                                  -0.474 -25.714
                                                   1.461
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         420
              N
                  LYS
                         49
                                  -2.185 - 26.983
                                                   2.206
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CA LYS
         421
                          49
                                  -3.164 -26.462
                                                   1.264 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         422
             CB
                 LYS
                         49
                                  -4.510 -27.180
                                                   1.447
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         423
              CG
                  LYS
                         49
                                  -5.502 -26.788
                                                   0.335
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             CD
                 LYS
                                  -6.806 -26.164
         424
                         49
                                                   0.846 1.00
                                                                 0.00
             CE LYS
ATOM
         425
                         49
                                  -6.639 - 24.836
                                                   1.590 1.00
                                                                 0.00
             NZ LYS
                                  -7.934 -24.206
ATOM
         426
                          49
                                                    1.908 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         427
              C
                  LYS
                         49
                                  -3.349 -24.953
                                                   1.401 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         428
              0
                  LYS
                         49
                                  -3.266 -24.226
                                                   0.411
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         429
              N
                  ASP
                         50
                                  -3.629 -24.488
                                                   2.622
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CA ASP
ATOM
         430
                          50
                                  -3.875 -23.083
                                                    2.894
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CB
                  ASP
         431
                          50
                                  -4.215 -22.845
                                                    4.366 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         432
             CG ASP
                          50
                                  -4.476 -21.359
                                                   4.582 1.00 0.00
```

```
133
                                                                   134
ATOM
        433
             OD1 ASP
                         50
                                                   5.287 1.00 0.00
                                 -3.656 -20.733
             OD2 ASP
                         50
                                 -5.478 -20.873
                                                   4.014 1.00 0.00
ATOM
        434
ATOM
        435
             C
                 ASP
                         50
                                 -2.689 -22.240
                                                   2.462 1.00
                                                                0.00
ATOM
        436
             0
                 ASP
                         50
                                 -2.870 -21.267
                                                   1.745
                                                         1.00
                                                                 0.00
ATOM
        437 N
                 ARG
                                 -1.480 -22.614
                                                   2.876 1.00
                         51
                                                                 0.00
        438
             CA
                 ARG
                                 -0.283 -21.881
ATOM
                         51
                                                   2.510 1.00
                                                                0.00
ATOM
             CB
                 ARG
                                  0.928 - 22.560
                                                   3.133 1.00
        439
                         51
                                                                 0.00
ATOM
        440
             CG
                 ARG
                                  2.175 -21.723
                                                         1.00
                         51
                                                   2.848
                                                                0.00
             CD
                 ARG
                                  3.258 -22.180
                                                          1.00
ATOM
        441
                         51
                                                   3.809
                                                                 0.00
             NE
                 ARG
                                  4.389 -21.256
ATOM
        442
                         51
                                                   3.817 1.00
                                                                 0.00
ATOM
             CZ
                 ARG
                                  5.427 -21.284
        443
                         51
                                                   2.975
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             NH1 ARG
                                  5.454 -22.151
        444
                         51
                                                   1.959
                                                          1.00
                                                                 0.00
             NH2 ARG
                                  6.443 -20.436
                                                          1.00
ATOM
        445
                         51
                                                   3.155
                                                                 0.00
        446
             С
                 ARG
                                 -0.143 -21.769
                                                   0.993 1.00
                                                                0.00
ATOM
                         51
ATOM
        447
             0
                 ARG
                         51
                                  0.084 - 20.675
                                                   0.472 1.00
                                                                 0.00
                 TRP
ATOM
        448
             N
                         52
                                 -0.282 -22.896
                                                   0.283
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 TRP
ATOM
        449
             CA
                         52
                                 -0.177 - 22.913
                                                  -1.163
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        450
             CB
                 TRP
                         52
                                 -0.358 - 24.345
                                                  -1.658
                                                          1.00
                                                                0.00
             CG
                 TRP
                                 -0.035 -24.559
ATOM
        451
                         52
                                                  -3.100
                                                           1.00
                                                                 0.00
             CD1 TRP
                                 -0.934 -24.633
ATOM
        452
                         52
                                                  -4.102
                                                           1.00
                                                                 0.00
             NE1 TRP
                                  -0.287 -24.848
                                                  -5.300
                                                           1.00
ATOM
        453
                         52
                                                                 0.00
ATOM
             CE2 TRP
                         52
                                   1.081 -24.918
                                                  -5.123
                                                           1.00
                                                                 0.00
        454
ATOM
        455
             CZ2 TRP
                         52
                                   2.157 -25.119
                                                  -6.002
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             CH2 TRP
                                   3.465 -25.138
                                                  -5.492
                                                           1.00
                                                                 0.00
        456
                         52
ATOM
        457
              CZ3 TRP
                         52
                                   3.679 -24.955
                                                  -4.115
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CE3 TRP
                         52
                                   2.596 -24.757
                                                  -3.243
                                                           1.00
                                                                 0.00
        458
ATOM
        459
              CD2 TRP
                         52
                                   1.269 -24.734
                                                  -3.722
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        460
              C
                  TRP
                         52
                                  -1.198 -21.951 -1.776
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         461
              0
                  TRP
                         52
                                  -0.845 -21.146
                                                  -2.633
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                  -2.452 -22.024
ATOM
         462
              N
                  ARG
                         53
                                                  -1.320
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         463
              CA
                  ARG
                         53
                                  -3.547 -21.172
                                                  -1.765
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CB
                  ARG
                                  -4.816 -21.584
                                                  -1.002
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         464
                         53
              CG
                  ARG
                                                                 0.00
ATOM
         465
                         53
                                  -6.044 - 20.728
                                                  -1.330
                                                           1.00
              CD
                  ARG
                                  -7.260 -21.197
                                                  -0.522
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         466
                         53
              NE
                  ARG
                         53
                                  -7.127 -20.905
                                                   0.918
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         467
              CZ ARG
                                  -8.143 -20.950
                                                   1.799
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         468
                         53
ATOM
         469
              NH1 ARG
                          53
                                  -7.960 -20.555
                                                   3.063
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         470
              NH2 ARG
                          53
                                  -9.336 -21.434
                                                    1.432
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  ARG
                                  -3.204 -19.693
ATOM
         471
              C
                          53
                                                  -1.548
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         472
              0
                  ARG
                          53
                                  -3.288 -18.888
                                                  -2.477
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         473
              N
                  THR
                                  -2.826 -19.343
                                                  -0.314
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         54
ATOM
         474
              CA
                  THR
                          54
                                  -2.478 -17.999
                                                    0.112
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THR
ATOM
         475
              CB
                          54
                                  -2.042 -17.998
                                                    1.585
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         476
              CG2 THR
                          54
                                  -1.850 - 16.566
                                                    2.072
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OG1 THR
                                                                 0.00
ATOM
         477
                          54
                                  -3.023 -18.572
                                                    2.413
                                                           1.00
              C
                  THR
ATOM
         478
                          54
                                  -1.397 -17.386
                                                  -0.776
                                                           1.00
                                                                 0.00
              0
                  THR
ATOM
         479
                          54
                                  -1.536 -16.236
                                                  -1.188
                                                           1.00
                                                                 0.00
              N
                  MET
                          55
                                  -0.328 -18.129
                                                  -1.075
                                                                 0.00
ATOM
         480
                                                           1.00
ATOM
              CA
                  MET
                                   0.736 - 17.603
                                                  -1.917
                                                           1.00
                                                                 0.00
         481
                          55
ATOM
              CB
         482
                  MET
                          55
                                   2.003 -18.453 -1.763 1.00 0.00
```

135 ATOM 483 CG MET 55 3.217 -17.633 -2.222 1.00 0.00 ATOM SD MET 55 4.735 -18.562 -2.5541.00 0.00 484 **ATOM** 485 CE MET 55 4.236 -19.386 -4.0841.00 0.00 **ATOM** 486 C MET 55 0.281 - 17.532-3.3801.00 0.00 0 MET 0.464 -16.511 -4.042 ATOM 487 55 1.00 0.00 -0.307 -18.626 -3.883ATOM 488 N LYS 56 1.00 0.00 **ATOM** 489 CA LYS 56 -0.790 -18.759 -5.251 1.00 0.00 CBLYS -1.487 -20.117 -5.422ATOM 490 56 1.00 0.00 CG LYS -2.026 -20.330 -6.844 ATOM 491 56 1.00 0.00 CD LYS -2.434 -21.788 -7.100 1.00 0.00 ATOM 492 56 **ATOM** CE LYS -3.452 -22.310-6.0761.00 0.00 493 56 ATOM 494 NZ LYS 56 -4.008 -23.614 -6.484 1.00 0.00 C LYS -1.692 -17.597 -5.669 0.00 ATOM 495 56 1.00 ATOM 496 0 LYS 56 -1.511 -17.066 - -6.760 1.00 0.00 ATOM N LYS -2.650 -17.197 -4.825 1.00 0.00 497 57 ATOM 498 CA LYS 57 -3.565 -16.103 -5.1441.00 0.00 ATOM 499 CB LYS 57 -4.598 -15.921 -4.0161.00 0.00 ATOM 500 CG LYS 57 -3.975 -15.400 -2.7081.00 0.00 ATOM 501 CD LYS -4.659 -14.134 -2.1691.00 0.00 57 ATOM 502 CE LYS 57 -3.744 -13.330 -1.228 1.00 0.00 NZ LYS ATOM 503 57 -3.116 -14.160 -0.184 1.00 0.00 ATOM 504 C LYS 57 -2.859 - 14.774-5.454 1.00 0.00 LYS -3.445 -13.920 ATOM 505 0 57 -6.1151.00 0.00 ATOM 506 N LEU 58 -1.626 -14.588 -4.9601.00 0.00 ATOM CA LEU -0.847 -13.368 -5.119 1.00 0.00 507 58 CB LEU ATOM 508 58 -0.208 -13.035 -3.758 1.00 0.00 CG LEU 0.755 - 11.835ATOM 509 58 -3.7661.00 0.00 CD1 LEU 0.045 -10.535 0.00 ATOM 510 58 -4.164 1.00 CD2 LEU ATOM 1.362 -11.679 -2.367 1.00 0.00 511 58 512 C LEU 0.225 -13.504 -6.198 1.00 ATOM 58 0.00 ATOM 513 LEU 0.288 -12.687 -7.114 0 58 1.00 0.00 ATOM 514 N LYS 59 1.093 -14.510 -6.0651.00 0.00 ATOM CA LYS 59 2.220 -14.714 -6.966 1.00 0.00 515 CB LYS ATOM 516 59 3.369 -15.376 -6.194 1.00 0.00 CG 3.786 -14.512 -4.990 ATOM 517 LYS 59 1.00 0.00 **ATOM** 518 CD LYS 59 5.014 -15.068 -4.2591.00 0.00 ATOM 519 CE LYS 59 6.322 -14.828 -5.021 1.00 0.00 7.482 -15.326 ATOM 520 NZ LYS 59 -4.257 1.00 0.00 ATOM 521 C LYS 59 1.881 -15.498 -8.234 1.00 0.00 ATOM 522 0 LYS 2.588 -15.348 -9.227 1.00 0.00 59 LEU **ATOM** 523 N 60 0.831 -16.329 -8.211 1.00 0.00 ATOM 524 CA LEU 0.410 -17.157 -9.337 60 1.00 0.00 ATOM 525 CB LEU 60 -0.200 -16.332 -10.485 1.00 0.00 ATOM 526 CG LEU 60 -1.602 -15.771 -10.184 1.00 0.00 CD1 LEU ATOM 527 60 -1.575 -14.575 -9.223 1.00 0.00 CD2 LEU -2.250 -15.326 -11.501 ATOM 528 60 1.00 0.00 ATOM 529 C LEU 60 1.574 -18.035 -9.799 1.00 0.00 ATOM 530 0 LEU 60 2.223 -17.767 -10.808 1.00 0.00 ATOM N 1.819 -19.088 -9.017 531 ILE 61 1.00 0.00 **ATOM** 532 CA ILE 2.878 -20.074 -9.195 1.00 0.00 61

```
137
                                                                   138
ATOM
        533 CB ILE
                                                         1.00 0.00
                         61
                                  2.647 -21.252 -8.225
             CG2 ILE
ATOM
                         61
        534
                                  3.725 -22.332 -8.406
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        535
             CG1 ILE
                         61
                                  2.651 -20.751 -6.767
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CD1
                 ILE
ATOM
        536
                         61
                                  2.107 -21.792 -5.789
                                                                 0.00
                                                          1.00
ATOM
        537 C
                  ILE
                         61
                                  3.000 -20.533 -10.651
                                                          1.00
                                                                 0.00
             0
                  ILE
ATOM
         538
                         61
                                  4.053 -20.357 -11.259
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         539
             N
                  SER
                         62
                                  1.937 -21.130 -11.201
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  SER
ATOM
         540 CA
                         62
                                  1.869 -21.643 -12.565
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  SER
ATOM
         541 CB
                         62
                                  2.728 -22.914 -12.703
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  SER
ATOM
         542
             OG
                         62
                                   4.099 -22.609 -12.857
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C
                  SER
ATOM
         543
                         62
                                  0.411 -21.963 -12.903
                                                          1.00
                                                                 0.00
             0
                  SER
                                                                 0.00
ATOM
         544
                         62
                                  -0.468 -21.873 -12.046
                                                          1.00
ATOM
             N
                  SER
         545
                         63
                                  0.168 -22.351 -14.159
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         546
             CA
                  SER
                         63
                                  -1.130 -22.734 -14.689
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         547
              CB
                  SER
                         63
                                  -1.894 -21.499 -15.181
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         548
             0G
                  SER
                                  -1.998 -20.541 -14.146
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         63
ATOM
         549
             C
                  SER
                         63
                                  -0.887 -23.732 -15.820
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         550
             0
                  SER
                         63
                                   0.201 -23.751 -16.396
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         551
             N
                  ASP
                         64
                                  -1.889 -24.563 -16.122
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         552
             CA
                  ASP
                                  -1.824 -25.582 -17.159
                                                                 0.00
                         64
                                                          1.00
ATOM
         553
              CB
                  ASP
                         64
                                  -2.655 -26.792 -16.702
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CG
ATOM
         554
                  ASP
                                  -4.144 -26.469 -16.644
                                                                 0.00
                         64
                                                          1.00
ATOM
         555
              OD1 ASP
                         64
                                  -4.892 -27.096 -17.424
                                                          1.00
                                                                 0.00
              OD2 ASP
ATOM
         556
                                  -4.497 -25.595 -15.820
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         64
ATOM
         557
              C
                  ASP
                                  -2.290 -25.008 -18.505
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         64
              0
                  ASP
                                  -2.302 -23.792 -18.690
ATOM
         558
                         64
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                          1.00
- ATOM
         559
              N
                  SER
                         65
                                  -2.661 -25.901 -19.433
                                                                 0.00
         560
ATOM
              CA
                  SER
                         65
                                  -3.134 -25.605 -20.779
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  SER
ATOM
         561
              CB
                          65
                                  -4.612 -25.184 -20.748
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  SER
ATOM
         562
              0G
                          65
                                  -4.793 -23.866 -20.276
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         563
              С
                  SER
                          65
                                  -2.185 -24.666 -21.540
                                                           1.00
                                                                 0.00
              0
                  SER
                                  -0.970 -24.755 -21.361
ATOM
         564
                          65
                                                           1.00
                                                                 0.00
              N
                  GLU
ATOM
         565
                          66
                                  -2.719 -23.784 -22.395
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CA
                  GLU
ATOM
                                  -1.951 -22.839 -23.192
                                                           1.00
                                                                 0.00
         566
                          66
              CB
                  GLU
                                                                 0.00
 ATOM
         567
                          66
                                  -1.236 -23.585 -24.333
                                                           1.00
         568
              CG
ATOM
                  GLU
                                  -0.473 -22.628 -25.251
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          66
ATOM
              CD
                  GLU
         569
                                   0.386 -23.388 -26.257
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          66
 ATOM
              OE1 GLU
         570
                          66
                                   1.609 -23.130 -26.274
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         571
              OE2 GLU
                          66
                                  -0.192 -24.225 -26.984
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         572
              С
                  GLU
                                  -2.930 -21.770 -23.678
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          66
                  GLU
 ATOM
         573
              0
                          66
                                  -2.890 -20.636 -23.201
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         574
              N
                  ASP
                          67
                                  -3.818 -22.164 -24.598
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         575
              CA
                  ASP
                          67
                                  -4.878 -21.343 -25.167
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         576
              CB ASP
                          67
                                  -5.985 -21.137 -24.117
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
              CG
                  ASP
                                  -6.474 -22.458 -23.528
         577
                          67
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OD1 ASP
 ATOM
         578
                          67
                                  -5.794 -22.961 -22.604
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
              OD2 ASP
         579
                          67
                                  -7.513 -22.955 -24.015
                                                           1.00
                                                                 0.00
         580
              С
                  ASP
 ATOM
                          67
                                  -4.334 -20.032 -25.748
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OT1 ASP
 ATOM
         581
                          67
                                  -3.395 -20.145 -26.566
                                                                 0.00
                                                           1.00
 ATOM
         582 OT2 ASP
                                  -5.067 -19.022 -25.652 1.00 0.00
                          67
```

(71)139 1.00 0.00 05' GUA ATOM 583 68 -5.955 -39.683 11.398 C5' -5.732 -40.378 ATOM 584 GUA 68 10.189 C4' GUA 585 -6.248 - 39.5888.980 ATOM 68 ATOM 586 04' GUA 68 -7.619 -39.264 9.109 GUA -7.912 -38.313 587 C1' 68 8.109 ATOM ATOM N9 GUA -9.157 -37.568 8.395 588 68 GUA 589 68 -9.508 -36.932 9.556 ATOM 68 N7 GUA -10.673 - 36.3489.517 ATOM 590 68 GUA 68 -11.123 -36.592 8.222 591 С5 ATOM ATOM 60 GUA -12.325 -36.178 7.569 592 68 06 GUA -13.279 -35.566 ATOM 593 68 8.047 N1 GUA -12.348 -36.537 6.226 ATOM 594 68 C2GUA ATOM 595 68 -11.349 -37.2465.589 ATOM 596 N2 GUA 68 -11.495 -37.493 4.286 ATOM N3 GUA -10.237 -37.665 6.207 597 68 ATOM 598 C4GUA -10.182 -37.304 7.516 68 ATOM 599 C3' GUA 68 -5.550 -38.238 8.755 ATOM 600 C2' GUA" 68 -6.704 -37.399 8.193 ATOM 03' GUA -4.455 -38.421 601 68 7.864 ATOM 602 P THY 69 -3.598 -37.197 7.229 ATOM 603 OP1 THY -2.403 -37.756 6.558 69 ATOM 604 OP2 THY 69 -3.440 -36.142 8.255 05' THY ATOM 605 -4.569 ~36.632 6.077 69 ATOM 606 C5' THY 69 -5.209 -37.5075.163 THY ATOM 607 C4' 69 -6.366 -36.799 4.456 ATOM 608 04' THY 69 -7.427 - 36.3585.269 C1' THY -8.088 -35.295 4.622 ATOM 609 69 ATOM 610 N1 THY 69 -8.922 -34.570 5.615 THY-ATOM C6 69 · -8.455 -34.388 6.896 611 ATOM 612 C5 THY. 69 -9.211 -33.774 7.839 1.00 0.00 -8.574 -33.592 ATOM 613 C7 THY 9.206 1.00 0.00 69 C4 THY -10.553 -33.310 1.00 0.00 ATOM 614 69 7.548 ATOM 615 04 THY -11.315 -32.764 8.341 1.00 0.00 69 N3THY -10.950 -33.534 ATOM 616 69 6.240 1.00 0.00 617 C2THY -10.191 -34.128 5.243 1.00 0.00 ATOM 69 ATOM 618 02 THY 69 -10.640 -34.241 4.106 1.00 0.00 C3' ATOM 619 THY 69 -5.915 -35.563 3.673 1.00 0.00 C2' THY ATOM 620 69 -6.889 - 34.4874.147 1.00 0.00 03' THY ATOM 621 69 -5.966 -35.829 2.285 1.00 0.00 622 THY 1.00 ATOM P -5.269 -34.858 1.203 0.00 70 ATOM 623 OP1 THY 70 -4.152 -34.141 1.863 1.00 0.00 OP2 THY ATOM 70 -4.996 -35.662 -0.0051.00 624 0.00 05' THY -6.416 -33.783 ATOM 625 70 0.8661.00 0.00 0.00 ATOM 626 C5' THY 70 -7.536 -34.125 0.072 1.00 C4' THY ATOM 627 70 -8.628 -33.057 0.207 1.00 0.00 04' THY -9.013 -32.916 ATOM 628 70 1.558 1.00 0.00 629 C1' THY 70 -9.676 -31.679 1.675 1.00 0.00 ATOM ATOM 630 N1 THY 70 -9.809 -31.284 3.100 1.00 0.00

ATOM

**ATOM** 

C6 THY

631

632 C5 THY

70

70

-8.729 -31.372

-8.831 -31.024

3.945

5.250

1.00

1.00

0.00

0.00

```
141
                                                                    142
ATOM
        633 C7
                 THY
                         70
                                 -7.565 -31.155
                                                    6.066
                                                          1.00 0.00
                  THY
                         70
                                 -10.077 -30.555
ATOM
        634
             C4
                                                    5.818
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                  THY
                         70
        635
             04
                                 -10.246 -30.197
                                                    6.980
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
        636
             N3
                         70
                                 -11.128 -30.541
                                                    4.918
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C2
                  THY
ATOM
        637
                         70
                                 -11.045 -30.834
                                                    3.566
                                                           1.00
                                                                 0.00
                 THY
ATOM
        638
             02
                         70
                                 -12.018 -30.662
                                                    2.836
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C3'
                  THY
ATOM
        639
                         70
                                  -8.192 -31.647
                                                   -0.221
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C2'
                 THY
ATOM
        640
                         70
                                  -8.748 -30.749
                                                    0.895
                                                           1.00
                                                                 0.00
             03'
                  THY
ATOM
        641
                         70
                                  -8.732 -31.350
                                                  -1.498
                                                           1.00
                                                                 0.00
        642 P
ATOM
                  ADE
                         71
                                  -8.328 -30.017
                                                  -2.316
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        643
             OP1 ADE
                         71
                                  -8.704 -30.209
                                                  -3.733
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP2 ADE
                                                  -1.969
ATOM
        644
                         71
                                  -6.932 -29.662
                                                           1.00
                                                                  0.00
             05' ADE
ATOM
        645
                         71
                                  -9.285 -28.890
                                                  -1.684
                                                           1.00
                                                                  0.00
             C5' ADE
                                 -10.658 -28.793
                                                  -2.014
ATOM
        646
                         71
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        647
             C4'
                  ADE
                         71
                                 -11.331 -27.707
                                                   -1.159
                                                           1.00
                                                                  0.00
             04'
                  ADE
                                 -11.528 -28.171
                                                           1.00
ATOM
        648
                         71
                                                    0.181
                                                                  0.00
ATOM
        649
             C1'
                  ADE
                         71
                                 -11.237 -27.101
                                                    1.052
                                                          1.00
                                                                  0.00
             N9
                  ADE
                                 -10.923 -27.449
ATOM
        650
                         71
                                                    2.459
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        651
              68
                  ADE
                         71
                                  -9.740 -27.935
                                                    2.954
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
             N7
                  ADE
                                  -9.616 -27.886
        652
                         71
                                                    4.247
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        653
              C5
                  ADE
                         71
                                 -10.824 -27.338
                                                    4.652
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        654
              6
                  ADE
                         71
                                 -11.327 -26.999
                                                    5.919
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        655
              N6
                  ADE
                         71
                                 -10.632 -27.220
                                                    7.036
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  ADE
                                 -12.534 -26.412
ATOM
        656
              N1
                         71
                                                    5.998
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        657
              C2
                  ADE
                         71
                                 -13.214 -26.189
                                                    4.875
                                                           1.00
                                                                  0.00
              N3
                  ADE
                                 -12.854 -26.470
                                                           1.00
ATOM
        658
                         71
                                                    3.624
                                                                  0.00
                                                                  0.00
ATOM
        659
              C4
                  ADE
                         71
                                 -11.630 -27.060
                                                    3.577
                                                           1.00
ATOM
        660
              C3'
                  ADE
                         71
                                 -10.460 -26.435
                                                   -1.056
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        661
              C2'
                  ADE
                         71
                                  -9.970 -26.618
                                                    0.368
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              03'
                  ADE
                                 -11.246 -25.268
                                                   -1.167
                                                           1.00
                                                                  0.00
        662
                         71
ATOM
         663
              P
                  GUA
                         72
                                 -10.633 -23.771
                                                   -1.250
                                                           1.00
                                                                  0.00
              OP1 GUA
ATOM
         664
                         72
                                 -10.480 -23.379
                                                   -2.666
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         665
              OP2 GUA
                          72
                                  -9.492 -23.612
                                                   -0.306
                                                           1.00
                                                                  0.00
              05'
                  GUA
ATOM
                          72
                                 -11.856 -22.959
                                                   -0.609
                                                           1.00
                                                                  0.00
         666
              C5'
                  GUA
                                                                  0.00
ATOM
         667
                          72
                                 -13.188 -23.095
                                                   -1.073
                                                           1.00
ATOM
              C4'
                  GUA
                                 -14.151 -22.633
                                                    0.026
                                                           1.00
                                                                  0.00
         668
                          72
              04'
                  GUA
                                 -13.913 -23.371
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         669
                          72
                                                    1.222
ATOM
              C1'
                  GUA
                                 -13.564 -22.508
                                                    2.292
                                                           1.00
         670
                          72
                                                                  0.00
ATOM
         671
              N9
                  GUA
                          72
                                 -12.488 -23.106
                                                    3.119
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         672
              С8
                  GUA
                          72
                                 -11.322 -23.681
                                                    2.689
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         673
              N7
                  GUA
                                 -10.479 -23.993
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          72
                                                    3.634
ATOM
         674
              C5
                  GUA
                          72
                                 -11.160 -23.631
                                                    4.795
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         675
              C6
                  GUA
                          72
                                 -10.773 -23.753
                                                    6.163
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         676
              06
                  GUA
                          72
                                  -9.720 -24.202
                                                    6.609
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         677
              N1
                  GUA
                          72
                                 -11.751 -23.298
                                                    7.040
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         678
              C2
                  GUA
                          72
                                 -12.965 -22.771
                                                    6.647
                                                            1.00
                                                                  0.00
              N2
                  GUA
ATOM
         679
                          72
                                 -13.772 -22.287
                                                    7.593
                                                           1.00
                                                                  0.00
              N3
                  GUA
                                 -13.328 -22.648
ATOM
         680
                          72
                                                    5.363
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              C4
                  GUA
                                 -12.392 -23.100
                                                                  0.00
         681
                          72
                                                    4.490
                                                           1.00
              C3' GUA
                                 -13.951 -21.159
ATOM
         682
                          72
                                                    0.380 1.00 0.00
```

(73)143 144 ATOM 683 C2' GUA 72 -13.029 -21.267 1.591 1.00 0.00 ATOM 684 03' GUA 72 -15.208 -20.5830.687 1.00 0.00 ATOM 685 P GUA 73 -15.400 -18.991 0.871 1.00 0.00 OP1 GUA ATOM 686 73 -16.828 -18.671 0.657 1.00 0.00 OP2 GUA -14.365 -18.296 1.00 ATOM 687 73 0.075 0.00 ATOM 688 05' GUA 73 -15.062 -18.779 2.427 1.00 0.00 C5' GUA -15.974 -19.181 1.00 0.00 ATOM 689 73 3.428 C4' GUA 73 -15.380 -18.946 4.818 1.00 0.00 ATOM 690 04' GUA 691 73 -14.226 -19.747 5.007 1.00 0.00 ATOM C1' GUA -13.340 -19.028 1.00 ATOM 692 73 5.830 0.00 GUA ATOM 693 N9 73 -11.979 -19.604 5.793 1.00 0.00 **ATOM** 694 68 GUA 73 -11.191 -19.876 4.707 1.00 0.00 GUA -10.043 -- 20.427 **ATOM** 695 N7 73 4.994 1.00 0.00 ATOM 696 C5 **GUA** 73 -10.069 -20.523 6.385 1.00 0.00 **C6** GUA -9.107 -21.057 7.295 0.00 ATOM 697 73 1.00 06 GUA -8.002 -21.524 7.032 1.00 0.00 ATOM 698 73 ATOM N1 GUA 73 -9.545 -21.027 8.617 1.00 0.00 699 **ATOM** 700 C2GUA 73 -10.764 -20.522 9.023 1.00 0.00 ATOM 701 N2 GUA 73 -11.039 -20.500 10.328 1.00 0.00 ATOM 702 N3 GUA 73 -11.659 -20.003 8.176 1.00 0.00 C4GUA ATOM 703 73 -11.255 -20.033 6.879 1.00 0.00 ATOM 704 C3' GUA 73 -14.928 -17.493 5.059 1.00 0.00 C2' ATOM 705 GUA 73 -13.410 -17.658 5.169 1.00 0.00 ATOM 706 03' GUA 73 -15.510 -17.043 6.269 1.00 0.00 707 P **GUA ATOM** 74 -15.378 -15.523 6.800 1.00 0.00 **ATOM** 708 OP1 GUA 74 -16.738 -14.961 6.953 1.00 0.00 OP2 GUA ATOM 709 -14.372 -14.806 5.986 1.00 0.00 74 GUA 05' -14.756 -15.758 ATOM 710 74 8.264 1.00 0.00 C5' ATOM GUA -15.502 -16.404 9.279 1.00 711 74 0.00 C4' GUA ATOM 712 74 --14.657 -16.574 10.546 1.00 0.00 04' GUA -13.494 -17.326 ATOM 713 10.234 1.00 0.00 74 1.00 ATOM 714 C1' GUA -12.340 -16.639 10.670 0.00 74 **ATOM** 715 N9 GUA 74 -11.207 -16.933 9.767 1.00 0.00 ATOM 68 GUA -11.129 -16.749 716 74 8.409 1.00 0.00 ATOM 717 N7 GUA 74 -9.998 -17.124 7.880 1.00 0.00 **ATOM** 718 C5 GUA 74 -9.275 -17.611 8.963 1.00 0.00 ATOM 719 C6 GUA 74 -7.978 -18.201 9.009 1.00 0.00 06 GUA -7.199 -18.378 8.076 ATOM 720 74 1.00 0.00 N1 GUA -7.624 -18.616 ATOM 721 74 10.289 1.00 0.00 ATOM 722 C2GUA -8.428 -18.474 11.403 1.00 0.00 74 0.00 ATOM 723 N2 GUA -7.951 -18.882 12.580 1.00 74 ATOM 724 N3 GUA -9.637 -17.903 11.366 1.00 0.00 74 10.121 C4**GUA** -10.008 -17.503ATOM 725 74 1.00 0.00 726 C3' GUA -14.170 -15.241 ATOM 74 11.133 1.00 0.00 ATOM 727 C2' GUA 74 -12.743 -15.171 10.596 1.00 0.00 ATOM 728 03' GUA 74 -14.222 -15.325 12.548 1.00 0.00 ATOM 729 P THY 75 -13.809 -14.100 13.515 1.00 0.00 OP1 THY ATOM 730 75 -13.538 -12.903 12.688 1.00 0.00 ATOM 731 OP2 THY 75 -14.792 -14.026 14.618 1.00 0.00

-12.409 -14.619 14.119 1.00 0.00

**ATOM** 

732

05' THY

75

```
145
                                                                    146
             C5' THY
ATOM
        733
                         75
                                 -12.366 -15.747 14.971
                                                           1.00 0.00
             C4'
ATOM
        734
                 THY
                         75
                                 -10.922 -16.066
                                                  15.364
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        735
             04'
                  THY
                         75
                                 -10.152 -16.283
                                                   14.193
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
        736
             C1'
                         75
                                  -8.897 -15.652
                                                  14.333
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        737
             N1
                  THY
                         75
                                  -8.318 -15.369
                                                   12.991
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        738
             C6
                  THY
                         75
                                  -9.048 -14.679
                                                   12.048
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
        739
             C5
                         75
                                  -8.571 -14.487
                                                   10.792
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
        740
             C7
                         75
                                  -9.432 -13.669
                                                   9.845
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C4
                  THY
ATOM
        741
                         75
                                  -7.299 -15.039
                                                   10.375
                                                          1.00
                                                                 0.00
        742
             04
                  THY
                         75
ATOM
                                  -6.831 -15.001
                                                   9.240
                                                           1.00
                                                                 0.00
             N3
                  THY
                                                   11.390
ATOM
        743
                         75
                                  -6.607 -15.672
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
             C2
                         75
                                  -7.047 -15.858
                                                   12.690
ATOM
        744
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        745
             02
                  THY
                         75
                                  -6.328 -16.432
                                                  13.503
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C3'
                  THY
                         75
                                 -10.239 -14.922
ATOM
        746
                                                  16.134
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        747
              C2'
                  THY
                         75
                                  -9.263 -14.379
                                                   15.091
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             03'
                  THY
        748
                         75
                                  -9.596 -15.468
                                                   17.272
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        749
             P
                  THY
                         76
                                  -8.767 -14.567
                                                   18.326
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OP1 THY
                                  -9.062 -15.054
ATOM
        750
                         76
                                                   19.692
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        751
              OP2 THY
                         76
                                  -8.952 -13.137
                                                   17.995
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        752
              05'
                  THY
                                  -7.253 -14.970
                                                  17.965
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         76
ATOM
        753
              C5'
                  THY
                         76
                                  -6.786 -16.288
                                                   18.181
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        754
              C4'
                  THY
                         76
                                  -5.337 -16.410
                                                  17.709
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        755
              04' THY
                         76
                                  -5.263 -16.051
                                                   16.340
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        756
              C1'
                  THY
                         76
                                  -4.126 -15.250
                                                   16.106
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        757
              N1
                  THY
                         76
                                  -4.359 -14.418
                                                   14.888
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C6
                  THY
                                  -5.445 -13.574
ATOM
        758
                         76
                                                  14.826
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         759
              C5
                  THY
                         76
                                  -5.765 -12.917
                                                   13.682
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        760
              C7
                  THY
                         76
                                  -6.957 -11.979
                                                   13.736
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        761
              C4
                  THY
                         76
                                  -5.007 -13.105
                                                   12.464
                                                           1.00
                                                                 0.00
              04
                  THY
                                  -5.269 -12.600
                                                   11.375
ATOM
        762
                          76
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                  -3.917 -13.947
ATOM
         763
              N3
                  THY
                          76
                                                   12.604
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              C2
                  THY
                                  -3.533 -14.593
                                                   13.774
                                                           1.00
                                                                  0.00
         764
                          76
              02
                  THY
                                                   13.792
                                                                  0.00
ATOM
        765
                          76
                                  -2.504 -15.269
                                                           1.00
              C3'
                  THY
                                  -4.388 -15.470
                                                   18.467
ATOM
         766
                          76
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C2' THY
                                                   17.398
ATOM
         767
                          76
                                  -4.035 -14.434
                                                           1.00
                                                                  0.00
              03' THY
                                  -3.276 -16.217
                                                   18.932
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         768
                          76
                  ADE
ATOM
         769
              P
                         77
                                  -2.053 -15.548
                                                   19.740
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         770
              OP1 ADE
                         77
                                  -1.463 -16.547
                                                   20.656
                                                           1.00
                                                                  0.00
              OP2 ADE
                          77
                                  -2.454 - 14.221
                                                   20.264
                                                                  0.00
ATOM
         771
                                                           1.00
ATOM
         772
              05' ADE
                          77
                                  -1.007 -15.285
                                                   18.560
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         773
              C5'
                  ADE
                          77
                                  -0.320 - 16.345
                                                   17.925
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         774
              C4'
                  ADE
                          77
                                   0.654 - 15.732
                                                   16.921
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  ADE
         775
              04'
                          77
                                  -0.078 -15.057
                                                   15.915
                                                                  0.00
ATOM
                                                           1.00
              C1' ADE
                                                                  0.00
ATOM
         776
                          77
                                   0.591 - 13.870
                                                   15.556
                                                           1.00
ATOM
         777
              N9
                  ADE
                          77
                                  -0.377 -12.948
                                                   14.914
                                                           1.00
                                                                  0.00
         778
              С8
                  ADE
                                  -1.494 -12.366
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
                          77
                                                   15.463
ATOM
         779
              N7
                  ADE
                          77
                                  -2.244 -11.723
                                                   14.615
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         780
              C5
                  ADE
                          77
                                  -1.556 -11.856
                                                   13.417
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         781
              C6
                  ADE
                          77
                                  -1.815 -11.395
                                                   12.115
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         782
              N6
                  ADE
                          77
                                  -2.903 -10.684 11.811 1.00
                                                                 0.00
```

	1.47				(, ,				140
ATOM	147 783	N 1	ADE	77	_0 012 -	_11 654	11 152	1.00	148 0.00
		N1			-0.913 -	-12.358	11.153		
ATOM	784	C2	ADE	77 77			11.456	1.00	0.00
ATOM	785	N3	ADE	77		-12.898	12.626	1.00	0.00
ATOM	786	C4	ADE	77	-0.403 -		13.589	1.00	0.00
ATOM	787	C3'	ADE	77		-14.665	17.592	1.00	0.00
ATOM	788	C2'	ADE	77		-13.370	16.908	1.00	0.00
ATOM	789	03'	ADE	77		-14.974	17.424	1.00	0.00
ATOM	790	P	GUA	78		¬14.088	18.113	1.00	0.00
ATOM	791		GUA	78		-14.971	18.390	1.00	0.00
ATOM	792		GUA	78	3.452	-13.281	19.205	1.00	0.00
ATOM	793	05'	GUA	78	4.424	-13.109	16.895	1.00	0.00
ATOM	794	C5'	GUA	78	5.023	-13.624	15.723	1.00	0.00
ATOM	795	C4'	GUA	78	5.043	-12.581	14.609	1.00	0.00
ATOM	796	04'	GUA:	78	3.719	-12.193	14.267	1.00	0.00
ATOM	797	C1'	GUA	78	3.745	-10.818	13.958	1.00	0.00
ATOM	798	N9	GUA	78	2.389	-10.225	13.968	1.00	0.00
ATOM	799	C8	GUA-	78	1.530	-10.058	15.025	1.00	0.00
ATOM	800	N7	GUA	78	0.411	-9.464	14.717	1.00	0.00
ATOM	801	C5	GUA	78	0.531	-9.214	13.353	1.00	0.00
ATOM	802	C6	GUA	78	-0.374	-8.581	12.447	1.00	0.00
ATOM	803	06	GUA	78	-1.475	-8.092	12.688	1.00	0.00
ATOM	804	N1	GUA	78	0.105	-8.564	11.142	1.00	0.00
ATOM	805	C2	GUA	78	i.315	-9.093	10.747	1.00	0.00
ATOM	806	N2	GUA	78	1.647	-8.978	9.461	1.00	0.00
ATOM	807	N3	GUA	78	2.173	-9.676	11.595	1.00	0.00
ATOM	808	C4	GUA	78	1.726	-9.703	12.881	1.00	0.00
ATOM	809	C3'	GUA	78		-11.291	15.002	1.00	0.00
ATOM	810	C2'	GUA	78		-10.296	15.089	1.00	0.00
ATOM	811	03'	GUA	78		-10.973	13.962	1.00	0.00
ATOM	812	P	GUA	79	7.776	-9.784	14.078	1.00	0.00
ATOM	813		GUA	79		-10.379	13.961	1.00	0.00
ATOM	814		GUA	79	7.441	-8.931	15.239	1.00	0.00
ATOM	815		GUA	79	7.463	-8.958	12.734	1.00	0.00
ATOM	816	C5'	GUA	79	7.743	-9.509	11.461	1.00	0.00
ATOM	817	C4'	GUA	79	7.183	-8.619	10.347	1.00	0.00
ATOM	818	04'	GUA	79	5.785	-8.462	10.536	1.00	0.00
ATOM	819	C1'	GUA	79	5.443	-7.091	10.524	1.00	0.00
ATOM	820	N9	GUA	79	4.287	-6.854	11.418	1.00	0.00
ATOM	821	C8	GUA	79	4.161	-7.168	12.748	1.00	0.00
ATOM	822	N7	GUA	79	3.021	-6.822	13.276	1.00	0.00
ATOM	823	C5	GUA	79	2.332	-6.239	12.219	1.00	0.00
ATOM	824	C6	GUA	79	1.028	-5.663	12.177	1.00	0.00
ATOM	825	06	GUA	79	0.222	-5.545	13.097	1.00	0.00
ATOM	826	N1	GUA	79	0.689	-5.200	10.911	1.00	0.00
ATOM	827	C2	GUA	79	1.517	-5.263	9.810	1.00	0.00
ATOM	828	N2	GUA	79	1.095	-4.697	8.678	1.00	0.00
ATOM	829	N3	GUA	79	2.745	-5.799	9.846	1.00	0.00
ATOM	830	C4	GUA	79	3.093	-6.268	11.074	1.00	0.00
ATOM	831	C3'	GUA	79	7.789	-7.208	10.336	1.00	0.00
ATOM	832	C2'	GUA	79	6.701	-6.400	11.041	1.00	0.00
					_		_		

```
149
                                                                  150
ATOM
        833 03' GUA
                        79
                                  7.992 -6.815
                                                  8.988 1.00 0.00
ATOM
        834
             P
                 GUA
                        80
                                  8.715 -5.427
                                                  8.586
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        835
            OP1 GUA
                         80
                                  9.560
                                        -4.982
                                                  9.715 1.00
                                                                0.00
        836
             OP2 GUA
                         80
                                  9.312 - 5.593
                                                  7.242 1.00
                                                                0.00
ATOM
ATOM
        837
             05'
                 GUA
                         80
                                  7.470 - 4.414
                                                  8.458
                                                         1.00
                                                                0.00
                                  6.569 -4.508
ATOM
        838
             C5'
                 GUA
                         80
                                                  7.373 1.00
                                                                0.00
ATOM
        839
             C4'
                 GUA
                         80
                                  5.438
                                        -3.489
                                                  7.534
                                                         1.00
                                                                0.00
        840
             04'
                 GUA
                         80
                                  4.697
                                         -3.763
                                                  8.706
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
             C1'
                 GUA
                                  4.211
                                        -2.539
                                                  9.202
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        841
                         80
             N9
                 GUA
                         80
                                  3.727
                                         -2.682
                                                 10.592
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        842
ATOM
             63
                 GUA
                         80
                                  4.390
                                        -3.187
                                                 11.681 1.00
                                                                0.00
        843
ATOM
        844
             N7
                 GUA
                         80
                                  3.679 - 3.216
                                                 12.773 1.00
                                                                0.00
                                        -2.702
ATOM
        845
             C5
                 GUA
                         80
                                  2.446
                                                 12.383
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        846
             60
                 GUA
                         80
                                  1.242
                                        -2.524
                                                 13.129
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
             06
                 GUA
                                  1.041
                                         -2.764
                                                 14.317
                                                          1.00
                                                                0.00
        847
                         80
ATOM
        848
             N1
                 GUA
                         80
                                  0.204
                                        -2.025
                                                 12.351
                                                          1.00
                                                                0.00
                                        -1.712
ATOM
        849
             C2
                 GUA
                         80
                                  0.309
                                                 11.012
                                                         1.00
                                                                0.00
                                         -1.216
                                                                0.00
ATOM
        850
             N2
                 GUA
                         80
                                 -0.769
                                                 10.402
                                                          1.00
             N3
                  GUA
                                  1.440 -1.868
                                                 10.310
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        851
                         80
             C4
                 GUA
                                  2.466
                                         -2.374
                                                 11.048
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        852
                         80
             C3'
                 GUA
                                         -2.039
        853
                                  5.931
                                                   7.695
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
                         80
             C2' GUA
                                         -1.677
                                                   9.102
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         854
                         80
                                  5.465
             03'
                  GUA
                                         -1.196
                                                   6.757
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         855
                                  5.293
                         80
             05'
                 CYT
                                 -8.894
                                         -0.011
                                                  15.330
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         856
                         81
ATOM
         857
              C5'
                 CYT
                         81
                                 -8.642
                                          0.942
                                                  14.317
                                                          1.00
                                                                0.00
              C4' CYT
                                                  13.343
                                                          1.00
                                                                0.00
                         81
                                 -7.565
                                          0.453
ATOM
         858
              04' CYT
                                 -6.377
                                          0.096
                                                  14.018
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         859
                         81
             C1' CYT
                                 -5.598
                                          -0.642
                                                 13.103 1.00
                                                                0.00
ATOM
         860
                         81
              N1
                  CYT
                                 -4.515
                                         -1.402
                                                 13.775
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         861
                         81
                                                 14.925
              60
                 CYT
                                 -4.776
                                         -2.104
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         862
                         81
ATOM
         863
              C5
                 CYT
                                 -3.819
                                         -2.836
                                                  15.539
                                                          1.00
                                                                0.00
                         81
                                         -2.833
                                                  14.943
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         864
              C4
                  CYT
                         81
                                 -2.513
ATOM
         865
              N4
                  CYT
                         81
                                 -1.515
                                         -3.517
                                                  15.504
                                                          1.00
                                                                0.00
              N3
                  CYT
                                 -2.271
                                         -2.164
                                                  13.810
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         866
                         81
              C2 CYT
                         81
                                 -3.252
                                         -1.454
                                                  13.187
                                                          1.00
                                                                0.00
 ATOM
         867
 ATOM
         868
              02
                  CYT
                         81
                                  -3.010
                                          -0.886
                                                  12.124
                                                          1.00
                                                                0.00
                                                          1.00
 ATOM
         869
              C3' CYT
                         81
                                  -7.943
                                          -0.809
                                                  12.553
                                                                0.00
              C2' CYT
                                  -6.626
                                          -1.586
                                                  12.496
                                                          1.00
                                                                0.00
 ATOM
         870
                         81
              03' CYT
                                                                0.00
 ATOM
         871
                         81
                                  -8.440
                                          -0.447
                                                  11.276
                                                          1.00
                  CYT
                                  -8.906
                                          -1.545
                                                  10.183
                                                          1.00
                                                                0.00
 ATOM
         872
              P
                         82
                                         -0.928
                                                   9.330
                                                          1.00
                                                                0.00
 ATOM
         873 OP1 CYT
                         82
                                  -9.945
         874, OP2 CYT
                         82
                                  -9.193 -2.810
                                                  10.894
                                                          1.00
                                                                0.00
 ATOM
         875 05' CYT
                         82
                                  -7.579 -1.764
                                                   9.289
                                                          1.00
                                                                0.00
 ATOM
 ATOM
         876
              C5' CYT
                         .82
                                  -7.074
                                          -0.738
                                                   8.453
                                                          1.00
                                                                0.00
 ATOM
         877
              C4' CYT
                         82
                                  -5.797
                                         -1.194
                                                   7.733
                                                          1.00
                                                                0.00
              04' CYT
                                  -4.812 -1.553
                                                   8.681
                                                                 0.00
 ATOM
         878
                         82
                                                          1.00
              C1' CYT
                                  -4.140 -2.730
                                                   8.280
                                                          1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         879
                          82
         880
              N1
                  CYT
                          82
                                  -3.740
                                          -3.462
                                                   9.505
                                                          1.00
                                                                0.00
 ATOM
                                                                0.00
                                          -3.705
 ATOM
         881
              C6
                  CYT
                          82
                                  -4.685
                                                  10.462 1.00
 ATOM
         882 C5 CYT
                          82
                                  -4.388 -4.320
                                                  11.622 1.00 0.00
```

151

883 C4 CYT

884

885 N3

886

887

888 C3**'** CYT

889

890

891

892

893

894

895

896

897

898

899

900

901 C5 CYT

902 C4 CYT

903 N4 CYT

904 N3 CYT

905

906

907

908

909

910 P

911

912

913

914 C5' THY

915

916

917

918 N1

919

920 C5 THY

921 C7 THY

922 C4THY

923 04 THY

924

925

926

927

928

929

930 P ADE

931

932

N4 CYT

C2CYT

02 CYT

03' CYT

P

C2' CYT

OP1 CYT

OP2 CYT

05' CYT

C5' CYT

C4' CYT

04' CYT

C1' CYT

N1 CYT

C6 CYT

C2 CYT

02 CYT

C3' CYT

C2' CYT

03' CYT

OP1 THY

OP2 THY

05' THY

04' THY

C1' THY

THY

C4' THY

**C6** THY

N3THY

02 THY

C3'

C2' THY

C2 THY

03' THY

OP1 ADE

OP2 ADE

THY

84

84

84

84

84

85

85

85

0.396 - 11.436

0.027 -11.270

-0.117 -11.857

0.823 - 12.086

0.361 - 13.570

-1.112 -13.561

1.212 -13.998

7.978

2.925

4.330

2.077

1.628

1.458

1.00

1.00

1.00

1.00

1.00

1.00

0.496 1.00 0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

THY

CYT

CYT

ATOM

ATOM ATOM

ATOM

ATOM

**ATOM** 

ATOM

ATOM

ATOM

ATOM

ATOM

ATOM

ATOM

ATOM

**ATOM** 

ATOM

ATOM

**ATOM** 

ATOM

ATOM

ATOM

ATOM

**ATOM** 

ATOM

**ATOM** 

ATOM

ATOM

ATOM

ATOM

ATOM

ATOM

ATOM ATOM

ATOM

ATOM

ATOM

ATOM

ATOM

ATOM

```
153
                                                                   154
ATOM
        933
             05' ADE
                                                   2.902 1.00 0.00
                         85
                                  0.724 - 14.508
ATOM
        934
             C5'
                 ADE
                         85
                                  2.075 - 14.758
                                                   3.262
                                                          1.00 0.00
ATOM
        935
             C4'
                 ADE
                                                          1.00
                         85
                                  2.242 -15.383
                                                   4.660
                                                                 0.00
             04'
                 ADE
ATOM
        936
                         85
                                  1.429 - 14.713
                                                   5.613 1.00
                                                                 0.00
             C1'
                 ADE
ATOM
        937
                         85
                                  0.591 -15.638
                                                   6.278
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        938
             N9
                 ADE
                         85
                                 -0.726 -15.023
                                                   6.569
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        939
             63
                  ADE
                         85
                                 -1.674 -14.571
                                                   5.685
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N7
                 ADE
ATOM
        940
                         85
                                 -2.734 -14.054
                                                   6.245 1.00
                                                                 0.00
                 ADE
ATOM
        941
             C5
                         85
                                 -2.473 - 14.179
                                                   7.603
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C6
                 ADE
                                 -3.211 -13.838
ATOM
        942
                         85
                                                   8.754
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                                          1.00
ATOM
             N6
                  ADE
                                 -4.422 -13.283
        943
                         85
                                                   8.693
                                                                 0.00
                                                           1.00
ATOM
        944
             N1
                  ADE
                         85
                                 -2.679 -14.096
                                                   9.961
                                                                 0.00
ATOM
        945
             C2
                  ADE
                                 -1.477 -14.654
                                                  10.017 1.00
                         85
                                                                 0.00
ATOM
        946
             N3
                 ADE
                         85
                                  -0.681 - 15.027
                                                   9.022
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        947
             C4
                  ADE
                                 -1.248 -14.760
                                                   7.815
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         85
             C3'
                 ADE
ATOM
        948
                         85
                                   1.925 -16.877
                                                    4.802
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C2'
                 ADE
ATOM
        949
                         85
                                  0.484 - 16.785
                                                   5.277
                                                          1.00 0.00
             03'
                 ADE
ATOM
        950
                         85
                                   2.784 -17.418
                                                    5.797
                                                          1.00
                                                                 0.00
             P
                  ADE
ATOM
        951
                         86
                                   2.888 -19.000
                                                   6.105
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OP1 ADE
ATOM
        952
                         86
                                   4.290 -19.420
                                                    5.873
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP2 ADE
                                   1.799 -19.696
        953
ATOM
                         86
                                                    5.392
                                                           1.00
                                                                0.00
             05' ADE
ATOM
        954
                         86
                                   2.575 - 19.103
                                                    7.684
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C5'
ATOM
        955
                 ADE
                                   3.471 -18.610
                                                           1.00
                         86
                                                    8.660
                                                                 0.00
             C4'
                  ADE
ATOM
        956
                         86
                                   2.904 - 18.767
                                                   10.079
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        957
             04'
                  ADE
                                   1.680 -18.058
                                                   10.201
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         86
             C1'
                 ADE
ATOM
        958
                         86
                                   0.605 - 18.942
                                                   10.464
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        959
             N9
                  ADE
                                  -0.586 -18.528
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         86
                                                    9.687
              C8
                  ADE
ATOM
        960
                                  -0.751 -18.502
                                                    8.325
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         86
ATOM
             N7
                  ADE
                                  -1.887 -18.002
                                                           1.00
        961
                         86
                                                    7.927
                                                                 0.00
ATOM
         962
             C5
                  ADE
                                  -2.535 -17.687
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         86
                                                    9.113
ATOM
         963
              C6
                  ADE
                                  -3.795 -17.122
                                                    9.395
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         86
                  ADE
ATOM
        964
              N6
                         86
                                  -4.646 -16.743
                                                    8.440
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         965
              N1
                  ADE
                                  -4.150 -16.962
                                                   10.682
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         86
ATOM
              C2
                  ADE
                                  -3.303 -17.331
                                                   11.637
         966
                         86
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         967
              N3
                  ADE
                                  -2.081 -17.834
                          86
                                                   11.507
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         968
              C4
                  ADE
                                  -1.752 -18.002
                                                   10.196
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          86
ATOM
         969
              C3'
                  ADE
                          86
                                   2.597 -20.210
                                                   10.497
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C2' ADE
ATOM
         970
                          86
                                   1.127 -20.328
                                                   10.087
                                                           1.00
                                                                 0.00
              03' ADE
ATOM
         971
                          86
                                   2.816 -20.348
                                                   11.899
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  CYT
ATOM
         972
              P
                                   2.658 -21.768
                                                   12.654
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          87
ATOM
         973
              OP1 CYT
                          87
                                   3.345 -21.709
                                                   13.963
                                                           1.00
                                                                  0.00
              OP2 CYT
ATOM
         974
                                   2.998 -22.847
                                                   11.705
                          87
                                                           1.00
                                                                  0.00
              05' CYT
ATOM
         975
                          87
                                   1.092 -21.818
                                                   12.972
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         976
              C5' CYT
                          87
                                   0.556 - 20.998
                                                   13.987
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         977
              C4' CYT
                          87
                                  -0.967 -21.025
                                                   13.975
                                                                  0.00
                                                           1.00
              04' CYT
ATOM
         978
                          87
                                  -1.484 - 20.567
                                                   12.749
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              C1' CYT
         979
                          87
                                  -2.840 -20.952
                                                   12.723
                                                           1.00
                                                                  0.00
              N1
                  CYT
                                  -3.404 -20.828
                                                   11.356
ATOM
         980
                          87
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              60
                  CYT
                          87
                                  -2.668 -21.210
                                                   10.262
                                                                  0.00
         981
                                                           1.00
ATOM
         982
             C5 CYT
                                  -3.114 -20.996
                                                    9.002 1.00 0.00
```

155 CYT -4.391 -20.355 8.863 1.00 0.00 ATOM 983 C4 87 ATOM 984 N4 CYT 87 -4.873 -20.052 7.661 1.00 CYT -5.116 -20.016 9.936 1.00 ATOM 985 N3 87 ATOM 986 C2 CYT 87 -4.662 -20.250 11.196 1.00 02 CYT 87 -5.360 -19.945 12.158 1.00 ATOM 987 C3**'** CYT -1.566 -22.42614.146 1.00 ATOM 988 87 C2' CYT -2.759 -22.400 1.00 989 87 13.181 ATOM 03' CYT -1.903 -22.599 15.510 1.00 ATOM 990 87 P CYT -2.573 -23.954 16.078 1.00 991 88 ATOM OP1 CYT -2.168 -25.075 15.200 1.00 ATOM 992 88 OP2 CYT -2.301 -24.019 17.530 1.00 ATOM 993 88 05' CYT -4.146 -23.673 15.859 1.00 ATOM 994 88 C5' CYT -4.809 -22.623 ATOM 995 88 16.544 1.00 C4' CYT -6.182 -22.358 15.913 1.00 ATOM 996 88 CYT 04' -6.044 -22.074 14.536 1.00 ATOM 997 88 C1' CYT -7.241 -22.419 13.875 ATOM 998 88 1.00 N1 CYT 88 -6.961 -22.669 12.440 1.00 ATOM 999 ATOM 1000 63 CYT 88 -5.862 -23.404 12.086 1.00 ATOM 1001 C5 CYT 88 -5.501 -23.575 10.798 1.00 ATOM 1002 C4 CYT 88 -6.339 -22.959 9.807 1.00 N4 CYT -6.014 -23.023 ATOM 1003 88 8.516 1.00 ATOM 1004 N3 CYT 88 -7.462 -22.313 10.154 1.00 ATOM 1005 C2CYT 88 -7.814 -22.168 11.462 1.00 ATOM 1006 02 CYT 88 -8.872 -21.621 11.757 1.00 ATOM 1007 C3' CYT 88 -7.140 -23.554 15.995 1.00 ATOM 1008 C2' CYT 88 -7.629 -23.724 14.558 1.00 03' CYT -8.177 -23.243 ATOM 1009 88 16.913 1.00 ATOM 1010 P CYT 89 -9.418 -24.233 17.209 1.00 OP1 CYT -9.021 -25.608 ATOM 1011 89 16.828 1.00 ATOM 1012 OP2 CYT 89 -9.907 -23.962 18.579 1.00 05' CYT **ATOM** 1013 -10.537 -23.72716.161 1.00 89 ATOM 1014 C5' CYT 89 -11.127 -22.442 16.270 1.00 C4' CYT -12.161 -22.223 15.158 ATOM 1015 89 1.00 1016 04' CYT -11.542 -22.326 13.891 1.00 ATOM 89 ATOM 1017 C1' CYT -12.413 -22.943 12.965 1.00 89 **ATOM** 1018 N1 CYT 89 -11.585 -23.657 11.962 1.00 1019 С6 CYT -10.530 -24.415 12.395 1.00 ATOM 89 ATOM 1020 С5 CYT 89 -9.647 -24.964 11.539 1.00 0.00 **ATOM** 1021 C4 CYT -9.873 -24.727 10.141 1.00 0.00 CYT -9.040 -25.233 ATOM 1022 N4 89 9.232 1.00 0.00 **ATOM** 1023 N3 CYT 89 -10.941 -24.038 9.715 1.00 0.00 1024 C2 CYT 89 -11.831 -23.501 10.601 0.00 ATOM 1.00 ATOM 1025 02 CYT 89 -12.824 -22.908 10.189 1.00 0.00 ATOM 1026 C3' CYT -13.286 -23.268 1.00 0.00 89 15.180 **ATOM** 1027 C2' CYT -13.180 -23.945 89 13.818 1.00 0.00 ATOM 1028 03' CYT -14.529 -22.610 15.390 1.00 0.00 89 1029 THY -15.939 -23.395 ATOM P 90 15.516 1.00 0.00 ATOM 1030 OP1 THY 90 -15.673 -24.765 16.009 1.00 0.00 OP2 THY -16.887 - 22.5240.00 ATOM 1031 90 16.243 1.00 -16.433 -23.501 13.984 1.00 0.00 ATOM 1032 05' THY 90

```
157
                                                                   158
ATOM
       1033 C5'
                 THY
                         90
                                 -16.775 -22.346 13.238
                                                          1.00 0.00
                                                  11.768
ATOM
       1034
             C4'
                 THY
                         90
                                 -16.998 -22.716
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1035
             04'
                 THY
                         90
                                 -15.832 -23.324
                                                  11.249
                                                           1.00
                                                                 0.00
                 THY
ATOM
       1036
            C1'
                         90
                                 -16.200 -24.264
                                                  10.266
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1037
             N1
                 THY
                         90
                                 -15.080 -25.224
                                                  10.087
                                                           1.00
                                                                 0.00
                 THY
                                                                 0.00
ATOM
       1038
            C6
                         90
                                 -14.546 -25.858
                                                  11.182
                                                          1.00
                  THY
ATOM
       1039
             C5
                         90
                                 -13.435 -26.622
                                                  11.083
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
       1040
             C7
                         90
                                 -12.957 -27.299
                                                   12.354
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
       1041
             C4
                         90
                                 -12.746 -26.787
                                                   9.821
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
       1042
             04
                         90
                                 -11.703 -27.415
                                                    9.659
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
       1043
             N3
                         90
                                -13.365 -26.156
                                                   8.754
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
       1044
            Ç2
                         90
                                 -14.534 -25.410
                                                    8.817
                                                           1.00
                                                                 0.00
             02
                  THY
ATOM
       1045
                         90
                                 -15.047 -24.974
                                                   7.790
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C3'
                 THY
ATOM
       1046
                         90
                                 -18.136 -23.727
                                                   11.552
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C2'
                  THY
ATOM
       1047
                         90
                                -17.432 -24.915
                                                   10.891
                                                           1.00
                                                                 0.00
             03'
                  THY
ATOM
       1048
                         90
                                -19.125 -23.135
                                                   10.723
                                                           1.00
                                                                 0.00
             P
ATOM
       1049
                  ADE
                         91
                                 -20.563 -23.824
                                                   10.460
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP1 ADE
ATOM
       1050
                         91
                                -20.926 -24.628
                                                   11.647
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP2 ADE
                                 -21.489 -22.778
ATOM
       1051
                         91
                                                    9.972
                                                           1.00
                                                                 0.00
       1052
             05'
                 ADE
                         91
                                 -20.264 -24.833
                                                    9.243
                                                           1.00
ATOM
                                                                 0.00
       1053
             C5'
                 ADE
ATOM
                         91
                                -20.142 -24.363
                                                    7.915
                                                          1.00
                                                                 0.00
       1054
             C4'
                 ADE
                         91
                                 -19.601 -25.469
ATOM
                                                    7.005
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1055
             04'
                 ADE
                                 -18.306 -25.866
                                                    7.397
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         91
             C1'
                  ADE
ATOM
       1056
                         91
                                 -18.057 -27.102
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                    6.771
             N9
                  ADE
ATOM
       1057
                         91
                                 -16.905 -27.767
                                                    7.405
                                                          1.00
                                                                 0.00
             С8
                  ADE
                                 -16.673 -27.956
ATOM
       1058
                         91
                                                    8.742 1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1059
             N7
                  ADE
                                 -15.532 -28.531
                                                    9.011 1.00
                                                                 0.00
                         91
ATOM
       1060
             C5
                  ADE
                                 -14.979 -28.752
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         91
                                                    7.752
ATOM
       1061
             C6
                  ADE
                                 -13.769 -29.325
                                                    7.318
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         91
ATOM
       1062
             N6
                  ADE
                         91
                                 -12.838 -29.777
                                                    8.162
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1063
             N1
                  ADE
                         91
                                 -13.548 -29.441
                                                    5.995
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C2
                  ADE
ATOM
       1064
                         91
                                 -14.468 - 28.994
                                                    5.144
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1065
              N3
                  ADE
                         91
                                 -15.624 -28.406
                                                    5.423
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C4
                  ADE
                                 -15.824 -28.313
        1066
                         91
                                                    6.764
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1067
              C3' ADE
                                 -20.423 -26.768
                                                    7.019
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          91
ATOM
        1068
              C2'
                  ADE
                          91
                                 -19.347 -27.862
                                                    7.048
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1069
              03'
                  ADE
                                 -21.250 -26.786
                                                    5.866
                                                           1.00
                                                                  0.00
        1070
              P
                  ADE
                          92
                                 -22.185 -28.041
ATOM
                                                    5.466
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1071 OP1 ADE
                          92
                                 -22.520 -28.796
                                                    6.693
                                                           1.00
                                                                  0.00
        1072
              OP2 ADE
                                 -23.268 -27.550
ATOM
                          92
                                                    4.585
                                                           1.00
                                                                  0.00
              05'
                  ADE
ATOM
        1073
                          92
                                 -21.186 -28.939
                                                    4.574
                                                           1.00
                                                                  0.00
             C5'
                 ADE
ATOM
        1074
                          92
                                 -20.638 -28.439
                                                    3.369
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1075
              C4'
                 ADE
                          92
                                 -19.580 -29.401
                                                          1.00
                                                                  0.00
                                                    2.823
ATOM
        1076
              04'
                 ADE
                          92
                                 -18.527 -29.566
                                                    3.760
                                                          1.00
                                                                  0.00
                  ADE
ATOM
        1077
              C1'
                          92
                                 -18.080 -30.901
                                                    3.701
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1078
              N9
                  ADE
                          92
                                 -17.335 -31.260
                                                    4.927
                                                           1.00
                                                                  0.00
              С8
                  ADE
                                 -17.751 -31.168
ATOM
        1079
                          92
                                                    6.232
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1080
              N7
                  ADE
                          92
                                 -16.868 -31.554
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                                    7.110
ATOM
        1081
              C5
                  ADE
                          92
                                 -15.784 - 31.932
                                                    6.329
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1082
             C6 ADE
                          92
                                 -14.512 -32.445
                                                    6.645 1.00 0.00
```

```
特開2003-135087
                                 (81)
        159
                                                                  160
 ATOM
        1083 N6
                  ADE
                         92
                                -14.128 -32.667
                                                  7.904 1.00 0.00
 ATOM
        1084
             N1
                  ADE
                         92
                                -13.660 -32.726
                                                  5.642 1.00 0.00
 ATOM
        1085
             C2
                  ADE
                         92
                                -14.052 -32.510
                                                  4.390
                                                         1.00
                                                               0.00
 ATOM
        1086
              N3
                  ADE
                         92
                                -15.219 -32.039
                                                  3.959
                                                         1.00
                                                               0.00
 ATOM
        1087
              C4
                  ADE
                         92
                                -16.056 -31.760
                                                  4.995
                                                         1.00
                                                               0.00
 ATOM
        1088
              C3'
                  ADE
                                -20.127 -30.811
                                                  2.545
                                                         1.00
                                                                0.00
                         92
 ATOM
        1089
             C2'
                  ADE
                         92
                                -19.411 -31.643
                                                  3.611
                                                         1.00
                                                                0.00
              03'
 ATOM
        1090
                  ADE
                         92
                                -19.773 -31.178
                                                  1.223
                                                         1.00
                                                               0.00
 ATOM
        1091
              P
                  CYT
                         93
                                -20.277 -32.547
                                                  0.536
                                                         1.00
                                                                0.00
 ATOM
        1092
              OP1 CYT
                         93
                                -20.670 -32.254
                                                  -0.860
                                                         1.00
                                                               0.00
 ATOM
        1093
              OP2 CYT
                         93
                                -21.231 -33.219
                                                   1.446
                                                         1.00
              05' CYT
        1094
                                -18.927 -33.418
                                                  0.508
 ATOM
                         93
                                                         1.00 0.00
 ATOM
        1095
             C5' CYT
                         93
                                -17.883 -33.123
                                                  -0.402
                                                         1.00
                                                               0.00
              C4' CYT
 ATOM
        1096
                                -16.706 -34.065
                                                  -0.141
                                                          1.00
                                                                0.00
                         93
              04'
                  CYT
 ATOM
        1097
                         93
                                -16.290 -33.914
                                                   1.197
                                                          1.00
                                                                0.00
        1098
              C1' CYT
 ATOM
                         93
                                -15.744 -35.127
                                                   1.657
                                                         1.00
                                                                0.00
             N1
                  CYT
                                -15.866 -35.182
 ATOM
        1099
                         93
                                                   3.134
                                                         1.00
                                                                0.00
 ATOM
              C6
                  CYT
                                -17.025 -34.767
        1100
                         93
                                                   3.741
                                                          1.00
                                                                0.00
              C5
                  CYT
 ATOM
        1101
                         93
                                -17.176 -34.803
                                                   5.083
                                                          1.00
                                                                0.00
 ATOM
        1102
                  CYT
                                -16.058 -35.282
              C4
                         93
                                                   5.846
                                                         1.00
                                                                0.00
 ATOM
        1103
              N4
                  CYT
                         93
                                -16.081 -35.252
                                                   7:180
                                                         1.00
                                                                0.00
 ATOM
        1104
              N3
                  CYT
                                -14.938 -35.708
                                                          1.00
                         93
                                                   5.247
                                                                0.00
        1105
 ATOM
              C2
                 CYT
                              -14.810 -35.683
                          93
                                                   3.892
                                                         1.00
                                                                0.00
 ATOM
        1106
              02
                 CYT
                                 -13.780 -36.095
                                                   3.365
                                                         1.00
                                                                0.00
. ATOM
        1107
              C3' CYT
                                 -17.085 -35.545
                                                  -0.289
                                                         1.00
                                                                0.00
                          93
 ATOM
        1108
              C2' CYT
                                 -16.637 -36.191
                                                  1.018
                                                         1.00
                                                                0.00
                          93
 ATOM
        1109
              03' CYT
                          93
                                 -16.409 -36.129 -1.383 1.00 0.00
 END
 HEADER 000000
 REMARK
              0.00531
                        1.65811
                                  0.02515
                                             0.01757
                                                       2.26839
                                                                 1.64291
  0.00000
 REMARK
                                             1.30462
               2.73851
                         0.24877
                                  0.40405
                                                       0.78106
 REMARK
              0.01102
                        0.00405
                                  0.00491
                                             0.02093
                                                       0.00966
 REMARK
                                                                       0
                  121
                                                   0
                                                             0
                             117
                                         4
        0
 REMARK
                 1378
                             305
                                                 273
                                                           340
                                       460
 REMARK
               0.03719
                         0.18357
                                   0.03351
                                             0.04882
                                                       0.18357
                                                                 0.13545
 REMARK
               4.50499
                         0.26025
 REMARK
                    2
                              0
                                         2
                                                   0
                                                             0
                                                                       0
        0
 ATOM
           1 N
                  GLU
                           1
                                  13.789 -25.054 28.296 1.00 0.00
 ATOM
           2
              CA
                  GLU
                                  12.599 -25.545
                                                  29.014
                                                          1.00
                                                                0.00
                           1
                                  12.663 -25.178
 ATOM
           3
              CB
                  GLU
                                                  30.503
                                                          1.00 0.00
                           1
 ATOM
              CG
                 GLU
                                  14.033 -25.423 31.146 1.00 0.00
```

	161							162	
ATOM	5	CD	GLU	1	14.017 -24.934	.32.590	1.00	0.00	
ATOM	6	0E1	GLU	1	14.082 -25.800	33.487	1.00	0.00	
ATOM	7	0E2	GLU	1	13.919 -23.699	32.757	1.00	0.00	
ATOM	8	С	GLU	1	11.336 -24.959	28.383	1.00	0.00	
ATOM	9	0	GLU	1	11.416 -24.312	27.338	1.00	0.00	
ATOM	10	N	LYS	2	10.178 -25.163	29.022	1.00	0.00	
ATOM	11	CA	LYS	2	8.900 -24.635	28.566	1.00	0.00	
ATOM	12	СВ	LYS	2	7.767 -25.508	29.130	1.00	0.00	
ATOM	13	CG	LYS	2	6.403 -25.155	28.513	1.00	0.00	
ATOM	14	CD	LYS	2	5.274 -26.056	29.032	1.00	0.00	
ATOM	15	CE	LYS	2	4.969 -25.809	30.517	1.00	0.00	
ATOM	16	NZ	LYS	2	3.790 -26.572	30.967	1.00	0.00	
ATOM	17	C	LYS	2	8.812 -23.171	29.016	1.00	0.00	
ATOM	18	0 .		2	7.999 -22.819	29.867	1.00	0.00	
ATOM	19	N	HIS	3	9.675 -22.326	28.440	1.00	0.00	
ATOM	20	CA	HIS	3	9.771 -20.904	28.739	1.00	0.00	
ATOM	21	CB	HIS	3	10.829 -20.666	29.832	1.00	0.00	
ATOM	22	CG	HIS	3	12.192 -21.276	29.584	1.00	0.00	
ATOM	23		HIS	3	13.107 -21.476	30.607	1.00	0.00	
ATOM	24		HIS	3	14.205 -22.030	30.065	1.00	0.00	
ATOM	25		HIS	3	14.092 -22.221	28.748	1.00	0.00	
ATOM	26		HIS	3	12.820 -21.738		1.00	0.00	
ATOM	27	C	HIS	3	10.023 -20.117		1.00	0.00	
ATOM	28	0	HIS	3	10.963 -19.328		1.00	0.00	
ATOM	29	N	ARG	4	9.166 -20.342		1.00	0.00	
ATOM	30	CA	ARG	4	9.199 -19.692	25.147	1.00	0.00	
ATOM	31	CB	ARG	4	9.989 -20.526	24.125	1.00	0.00	
ATOM	32	CG	ARG	4	11.439 -20.764		1.00	0.00	
ATOM .	33	CD	ARG	4	12.301 -21.337		1.00	0.00	
ATOM	34	NE	ARG	4	12.492 -20.376		1.00	0.00	
ATOM	35	CZ	ARG	4 .	13.330 -19.324		1.00	0.00	
ATOM	36		ARG	4	14.063 -19.053		1.00	0.00	
ATOM	37		ARG	4	13.431 -18.538		1.00	0.00	
ATOM	38	C	ARG	4	7.755 -19.494		1.00	0.00	
ATOM	39	0	ARG	4	6.838 -20.088		1.00	0.00	
ATOM	40	N	ALA	5	7.560 -18.658		1.00	0.00	
ATOM	41	CA	ALA	5	6.254 -18.347	23.093	1.00	0.00	
ATOM	42	CB	ALA	5	5.765 -17.023		1.00	0.00	
ATOM	43	С	ALA	5	6.347 -18.316		1.00	0.00	
ATOM	44	0	ALA	5	7.204 -18.984		1.00	0.00	
ATOM	45	N	ARG	6	5.468 -17.541	20.918	1.00	0.00	
ATOM	46	CA	ARG	6	5.368 -17.363	19.475	1.00	0.00	
ATOM	47	CB	ARG	6	6.378 -16.327	18.941	1.00	0.00	
ATOM	48	CG	ARG	6	7.868 -16.544		1.00	0.00	
ATOM	49	CD	ARG	6	8.675 -15.415		1.00	0.00	
ATOM	50	NE	ARG	6	8.610 -15.479		1.00	0.00	
ATOM	51	CZ	ARG	6	8.513 -14.448	16.226	1.00	0.00	
ATOM	52	NH1	ARG	6	8.308 -13.192	16.651	1.00	0.00	
ATOM	53	NH2	ARG	6	8.638 -14.693	14.914	1.00	0.00	
ATOM	54	C	ARG	6	5.306 -18.690	18.708	1.00	0.00	

163 ATOM 55 0 ARG 6 6.199 -19.023 17.931 1.00 0.00 N LYS 7 18.938 ATOM 56 4.223 - 19.4491.00 0.00 LYS 7 18.319 ATOM 57 CA 3.977 - 20.7461.00 0.00 CB LYS 7 3.057 -21.582 19.224 **ATOM** 58 1.007 CG LYS 3.078 -23.068 18.824 ATOM 59 1.00 **ATOM** 60 CD LYS 7 1.930 -23.853 19.474 1.00 CE LYS 7 0.709 - 24.00818.556 ATOM 61 1.00 NZ LYS 7 0.140 - 22.72218.111 1.00 ATOM 62 63 C LYS 7 3.406 -20.599 ATOM 16.902 1.00 0 LYS 7 2.283 -21.034 16.630 ATOM 64 1.00 ATOM 65 N ARG 8 4.201 - 19.99916.011 1.00 CA ARG 8 3.899 -19.780 14.603 ATOM 66 1.00 ATOM 67 CB ARG 8 3.498 -18.319 14.355 1.00 ARG ATOM 2.157 -17.921 14.993 68 CG 8 1.00 ATOM CD ARG 8 0.975 - 18.65614.358 1.00 ARG ATOM 70 NE 8 -0.311 -17.975 14.573 1.00 ATOM CZ ARG 8 -0.746 - 16.88913.910 1.00 NH1 ARG 14.169 ATOM 8 -1.972 -16.420 NH2 ARG 8 0.041 -16.271 13.017 ATOM 73 1.00 C ATOM ARG: 8 5.170 -20.155 13.837 1.00 0.00 74 0 8 ATOM 75 ARG 6.152 -19.415 13.862 1.00 0.00 N GLN ATOM 9 5.159 -21.317 13.178 1.00 0.00 76 ATOM CA GLN 9 6.291 -21.848 77 12.436 1.00 0.00 ATOM 78 CB GLN 9 6.083 -23.364 12.299 1.00 0.00 ATOM CG GLN 9 7.329 -24.179 11.930 1.00 0.00 79 ATOM CD GLN 9 7.020 -25.675 11.768 1.00 0.00 80 ATOM OE1 GLN 9 7.882 -26.445 11.352 1.00 0.00 81 NE2 GLN 5.799 -26.111 12.087 ATOM 82 9 1.00 0.00 C 9 6.410 - 21.13611.086 ATOM 83 GLN 1.00 0.00 ATOM 0 GLN-9 5.788 -21.546 - 10.106 1.00 84 0.00 ATOM N ALA' 7.220 -20.072 11.041 1.00 85 10 0.00 ATOM 86 CA ALA 10 7.472 -19.293 9.836 1.00 0.00 ATOM 87 CBALA 10 8.425 -18.141 10.160 1.00 0.00 С 8.063 -20.208 ATOM 88 ALA 10 8.763 1.00 0.00 **ATOM** 0 9.038 -20.910 9.028 1.00 89 ALA 10 0.00 ATOM 90 N TRP 7.469 -20.218 7.567 1.00 0.00 11 ATOM CA TRP 7.922 -21.066 1.00 91 6.475 0.00 11 6.770 -21.312 ATOM 92 CBTRP 11 5.501 1.00 0.00 ATOM CG TRP 5.606 -22.127 93 5.986 1.00 0.00 11 ATOM 94 CD1 TRP 11 4.759 -21.804 6.990 1.00 0.00 ATOM NE1 TRP 3.804 -22.786 7.146 1.00 0.00 95 11 CE2 TRP 3.999 -23.804 ATOM 96 11 6.238 1.00 0.00 1.00 ATOM CZ2 TRP 11 3.318 -25.001 5.993 0.00 ATOM CH2 TRP 3.772 -25.853 4.980 1.00 0.00 98 11 ATOM 99 CZ3 TRP 4.898 -25.502 4.218 1.00 0.00 11 **ATOM** 100 CE3 TRP 11 5.575 -24.295 4.470 1.00 0.00 CD2 TRP 5.145 -23.415 5.485 1.00 0.00 ATOM 101 11 С ATOM 102 TRP 9.098 -20.439 5.719 1.00 0.00 11 ATOM 103 0 TRP 11 9.146 -19.222 5.542 1.00 0.00 104 N LEU 10.026 -21.283 ATOM 12 5.255 1.00 0.00

```
165
                                                                  166
ATOM
        105 CA LEU
                                 11.198 -20.907
                                                  4.469 1.00 0.00
                        12
ATOM
             CB
                 LEU
                        12
                                 12.465 -20.854
                                                  5.339
                                                         1.00
                                                               0.00
        106
             CG LEU
                        12
                                 12.794 -22.172
                                                  6.062 1.00
                                                                0.00
ATOM
        107
ATOM
        108
             CD1 LEU
                        12
                                 14.311 -22.386
                                                  6.088
                                                         1.00
                                                                0.00
        109
             CD2 LEU
                        12
                                 12.279 -22.151
                                                  7.508
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
ATOM
        110
            C
                 LEU
                         12
                                 11.328 -21.862
                                                  3.277
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        111 0
                 LEU
                         12
                                 10.548 -22.811
                                                   3.159
                                                         1:00
                                                                0.00
                                                   2.375 1.00
ATOM
        112 N
                 TRP
                         13
                                 12.298 -21.625
                                                                0.00
                                12.432 -22.480
ATOM
        113 CA
                 TRP
                         13
                                                   1.200 1.00
                                                                0.00
                                 13.405 -22.000
                                                         1.00
ATOM
        114
             CB
                 TRP
                         13
                                                   0.121
                                                                0.00
                 TRP
                                 14.873 -22.099
                                                   0.402 1.00
ATOM
        115
             CG
                         13
                                                                0.00
ATOM
        116
             CD1 TRP
                         13
                                 15.633 -21.013
                                                   0.583
                                                         1.00
                                                                0.00
                                 16.941 -21.362
                                                         1.00
ATOM
        117
             NE1 TRP
                         13
                                                   0.833
                                                                0.00
                                                                0.00
ATOM
        118
             CE2 TRP
                         13
                                 17.089 -22.734
                                                   0.817 1.00
             CZ2 TRP
                                 18.199 -23.572
                                                   1.011 1.00
                                                                0.00
ATOM
        119
                         13
ATOM
        120
             CH2 TRP
                         13
                                 18.030 -24.962
                                                   0.929
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        121
             CZ3 TRP
                         13
                                 16.760 -25.493
                                                   0.651
                                                         1.00 0.00
ATOM
        122
             CE3 TRP
                         13
                                 15.659 -24.644
                                                   0.453
                                                          1.00
                                                               0.00
             CD2 TRP
                                 15.783 -23.240
                                                   0.536
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        123
                         13
ATOM
        124
             C
                  TRP
                         13
                                 12.664 -23.942
                                                   1.509
                                                          1.00
                                                                0.00
        125
             0
                  TRP
                                 12.378 -24.739
                                                   0.638
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
                         13
ATOM
        126
             N
                  GLU
                         14
                                  13.154 -24.356
                                                   2.678
                                                          1.00
                                                                0.00
                                                   2.885
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        127
             CA
                 GLU
                                  13.303 -25.794
                         14
ATOM
        128
             CB
                 GLU
                         14
                                  13.893 -26.091
                                                   4.267
                                                          1.00
                                                                0.00
             CG
                 GLU
                                  15.310 -25.526
                                                   4.464
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        129
                         14
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
         130
             CD
                 GLU
                         14
                                  16.407 -26.341
                                                   3.782
                                                          1.00
                                                                0.00
             OE1 GLU
                                  16.074 -27.364
                                                   3.144
ATOM
         131
                         14
             OE2 GLU
                                  17.577 -25.926
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         132
                         14
                                                   3.927
             C
                  GLU
                                  11.927 -26.440
                                                   2.686
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         133
                         14
                                                                0.00
ATOM
         134
             0
                  GLU
                         14
                                  11.769 -27.377
                                                   1.900 1.00
                                  10.924 -25.890
                                                   3.373 1.00
                                                                0.00
ATOM
             N
                  GLU
         135
                         15
              \mathsf{CA}
                 GLU
                                  9.554 -26.342
                                                   3.287
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         136
                         15
              CB
                  GLU
                                  8.742 -25.716
                                                   4.420
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         137
                         15
              CG
                 GLU
                                  9.298 -26.053
                                                   5.812 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         138
                         15
                                  9.193 -24.844
              CD
                  GLU
                                                   6.727
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         139
                         15
                                  9.860 -23.840
                                                   6.402 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         140
              OE1 GLU
                         15
              OE2 GLU
                                   8.432 -24.937
                                                   7.713
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         141
                         15
ATOM
         142
             C
                  GLU
                         15
                                   8.944 -25.987
                                                   1.927
                                                          1.00
                                                                 0.00
         143
              0
                  GLU
                         15
                                   8.378 -26.862
                                                   1.286
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                                   9.028 - 24.728
                                                   1.475
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         144
              N
                  ASP
                         16
ATOM
         145
              CA
                  ASP
                          16
                                   8.419 -24.326
                                                   0.203
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                   8.477 -22.811
              CB
                  ASP
                                                  -0.010
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         146
                          16
              CG ASP
                          16
                                   7.844 -22.029
                                                   1.129 1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         147
              OD1 ASP
                                   6.686 - 22.340
                                                   1.479 1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         148
                          16
              OD2 ASP
                                   8.505 -21.086
                                                   1.611 1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         149
                          16
                  ASP
                                   9.011 -25.037
                                                  -1.016
                                                          1.00
 ATOM
         150
              C
                          16
                                                                 0.00
              0
                  ASP
                                   8.281 -25.375
                                                  -1.941
                                                          1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         151
                          16
                                  10.325 -25.259
 ATOM
         152
              N
                  LYS
                                                  -1.036
                                                          1.00
                                                                 0.00
                          17
                                  11.034 -25.921
                                                                 0.00
 ATOM
         153
              CA
                  LYS
                          17
                                                  -2.124
                                                          1.00
         154 CB LYS
                                  12.556 -25.691 -1.987 1.00 0.00
 ATOM
                          17
```

```
特開2003-135087
        168
     0.00
     0.00
     0.00
     0.00
     0.00
      0.00
     0.00
     0.00
      0.00
      0.00
      0.00
      0.00
1.00
      0.00
      0.00
1.00
      0.00
1.00
      0.00
1.00
      0.00
1.00
      0.00
1.00
      0.00
1.00
      0.00
1.00
      0.00
1.00
      0.00
1.00
      0.00
      0.00
1.00
      0.00
1.00
      0.00
1.00
      0.00
1.00
      0.00
1.00
      0.00
1.00
      0.00
1.00
      0.00
1.00
      0.00
      0.00
1.00
1.00
      0.00
1.00
      0.00
1.00
      0.00
1.00
      0.00
1.00
      0.00
1.00
      0.00
1.00
      0.00
```

```
167
ATOM
        155
             CC
                 LYS
                         17
                                 13.328 -26.192 -3.212 1.00 0.00
                                 14.833 -26.000
                                                  -2.973
ATOM
        156
             CD
                 LYS
                         17
                                                          1.00
ATOM
        157
             CE
                 LYS
                         17
                                 15.688 -26.604
                                                 -4.094
                                                          1.00
        158
             NZ
                 LYS
                         17
                                 15.459 -25.945
                                                  -5.394
                                                          1.00
ATOM
ATOM
        159
             C
                  LYS
                         17
                                 10.611 -27.396
                                                  -2.126
                                                          1.00
        160
             0
                  LYS
                                 10.243 -27.938
                                                  -3.171
                                                          1.00
ATOM
                         17
ATOM
        161 N
                  ASN
                         18
                                 10.630 -28.039
                                                  -0.948
                                                          1.00
        162 CA
                  ASN
                         18
                                  10.205 -29.425
                                                  -0.781
                                                          1.00
ATOM
ATOM
        163
             CB
                 ASN
                         18
                                  10.409 -29.801
                                                   0.691
                                                          1.00
                  ASN
ATOM
        164
             CG
                         18
                                  9.933 - 31.206
                                                   1.031
                                                          1.00
ATOM
        165
             OD1 ASN
                         18
                                  10.459 -32.186
                                                   0.512 1.00
ATOM
        166
             ND2 ASN
                         18
                                   8.949 -31.299
                                                   1.922
                                                          1.00
ATOM
        167
             C
                  ASN
                         18
                                   8.742 -29.582
                                                  -1.233
                                                          1.00
ATOM
        168
             0
                  ASN
                         18
                                   8.406 - 30.499
                                                  -1.983
ATOM
        169
             N
                  LEU
                         19
                                   7.882 - 28.660
                                                  -0.787
                                                          1.00
ATOM
        170
             CA
                 LEU
                         19
                                   6.465 - 28.592
                                                  -1.111
ATOM
         171
             CB
                 LEU
                         19
                                   5.834 ~27.394
                                                  -0.384
              CG
                 LEU
                                   4.367 -27.110
                                                  -0.738
ATOM
         172
                         19
ATOM
        173
              CD1 LEU
                         19
                                   3.486 -28.328
                                                  -0.457
              CD2 LEU
                                   3.880 -25.923
                                                   0.102
ATOM
        174
                         19
ATOM
         175
             С
                  LEU
                         19
                                   6.286 - 28.487
                                                  -2.623
              0
                  LEU
                                   5.580 -29.302
                                                   -3.204
ATOM
         176
                         19
             N
                  ARG
                         20
                                   6.928 - 27.499
                                                  -3.258
ATOM
         177
              CA
                  ARG
                                   6.872 -27.280
                                                  -4.699
ATOM
         178
                         20
ATOM
         179
              CB
                  ARG
                         20
                                   7.810 -26.136
                                                  -5.103
                                                          1.00
                                   7.178 -24.765
ATOM
              CG
                  ARG
                                                  -4.823
         180
                         20
ATOM
         181
              CD
                  ARG
                         20
                                   8.243 -23.667
                                                  -4.861
              NE
                 ARG
                                   7.649 -22.334
                                                  -4.669
ATOM
         182
                          20
ATOM
         183
              CZ ARG
                          20
                                   7.282 -21.487
                                                  -5.646
              NH1 ARG
                                   7.372 -21.846
                                                  -6.932
ATOM
         184
                          20
ATOM
         185
              NH2 ARG
                          20
                                   6.818 -20.272
                                                  -5.331
ATOM
         186
              C
                  ARG
                          20
                                   7.224 -28.568
                                                   -5.443
              0
                  ARG
                                   6.547 -28.919
                                                   -6.407
ATOM
         187
                          20
                  SER
                                   8.264 -29.281
                                                   -4.994
ATOM
         188
              N
                          21
              CA
                  SER
                                   8.667 -30.539
                                                   -5.609
ATOM
         189
                         21
         190
              CB
                  SER
                          21
                                   9.936 -31.074
                                                   -4.935
ATOM
ATOM
         191
              OG.
                  SER
                          21
                                  10.948 -30.086
                                                   -4.936
                                                   -5.538
ATOM
         192
              C
                  SER
                          21
                                   7.510 -31.545
                  SER
                                   7.136 - 32.141
                                                   -6.550
ATOM
         193
              0
                          21
         194
              N
                  GLY
                          22
                                   6.933 -31.716
                                                  -4.343
 ATOM
              CA
                  GLY
                                   5.809 -32.610
                                                  -4.115
 ATOM
         195
                          22
              C
                  GLY
                          22
                                   4.606 -32.249
                                                  -4.988
                                                           1.00
                                                                  0.00
         196
 ATOM
                                   3.994 -33.130
         197
              0
                  GLY
                          22
                                                   -5.588
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
 ATOM
         198
              N
                  VAL
                          23
                                   4.269 -30.957
                                                   -5.069
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CA VAL
                          23
                                   3.157 -30.465
                                                  -5.867
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         199
              CB VAL
                                   2.859 -28.989
                                                   -5.553
 ATOM
         200
                          23
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         201
              CG1 VAL
                          23
                                   1.796 - 28.445
                                                   -6.515
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CG2 VAL
                                   2.323 -28.846
 ATOM
         202
                          23
                                                   -4.124
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         203
              С
                  VAL
                          23
                                   3.427 -30.703
                                                   -7.351
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         204
              0 VAL
                          23
                                   2.522 -31.105 -8.070 1.00 0.00
```

(85)

```
169
                                                                   170
ATOM
        205 N
                 ARG
                        24
                                  4.652 -30.481 -7.838 1.00 0.00
ATOM
        206
             CA
                 ARG
                         24
                                  4.935 -30.734 -9.245
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        207
             CB
                 ARG
                         24
                                  6.307 -30.163 -9.642
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        208
            CG
                 ARG
                         24
                                  6.389 -29.952 -11.163
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        209
             CD
                 ARG
                         24
                                  7.752 -29.370 -11.572 1.00
                                                                0.00
ATOM
        210
             NE
                 ARG
                         24
                                  7.807 -29.010 -12.999
                                                          1.00
                                                                0.00
                                  7.889 -29.860 -14.037
ATOM
        211
             CZ
                 ARG
                         24
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        212
             NH1 ARG
                                  7.992 -29.362 -15.273 1.00 \ 0.00
                         24
ATOM
             NH2 ARG
                                  7.874 -31.186 -13.845
        213
                         24
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
             C
                 ARG
                                  4.810 -32.238 -9.532
        214
                         24
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        215
             0
                 ARG
                                  4.433 -32.625 -10.635
                         24
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        216 N
                 LYS
                         25
                                  5.118 -33.086
                                                 -8.537
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        217 CA
                 LYS
                         25
                                  5.047 -34.535
                                                 -8.664
                                                          1.00
                                                                0.00
                                                                0.00
ATOM
        218
             CB
                 LYS
                         25
                                  5.925 -35.183
                                                 -7.577
                                                         1.00
ATOM
        219
             CG
                 LYS
                         25
                                  6.289 -36.647
                                                 -7.881
                                                          1.00
                                                                0.00
                 LYS
ATOM
        220
             CD
                         25
                                  7.306 - 36.857
                                                 -9.020
                                                          1.00
                                                                0.00
        221
             CE
                 LYS
                         25
ATOM
                                  8.784 -36.702
                                                 -8.629
                                                          1.00
                                                                0.00
             NZ
                 LYS
                         25
ATOM
        222
                                  9.147 -35.330
                                                  -8.224
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        223
             C
                 LYS
                         25
                                  3.617 -35.096
                                                  -8.629
                                                          1.00
                                                                0.00
        224
             0
                 LYS
                         25
ATOM
                                  3.299 -35.959
                                                 -9.444
                                                          1.00
                                                                0.00
        225
             N
                 TYR
ATOM
                         26
                                                 -7.682
                                  2.775 -34.655
                                                          1.00
                                                                0.00
                 TYR
ATOM
        226
             CA
                         26
                                  1.417 -35.179 -7.491
                                                          1.00
                                                                0.00
                 TYR
ATOM
        227
             CB
                                  1.283 -35.670
                                                 -6.041
                         26
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CG
                 TYR
ATOM
        228
                         26
                                  2.412 -36.560
                                                 -5.550
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        229
             CD1 TYR
                         26
                                  2.892 -37.612
                                                 -6.355
                                                          1.00
                                                                0.00
             CE1 TYR
ATOM
        230
                         26
                                  3.939 -38.428
                                                 -5.899
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             CZ TYR
        231
                         26
                                  4.507 -38.201
                                                  -4.635
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        232
             OH TYR
                         26
                                  5.525 - 38.992
                                                 -4.189
                                                          1.00
                                                                0.00
             CE2 TYR
ATOM
        233
                                  4.029 -37.155
                                                  -3.829
                                                          1.00
                         26
                                                                0.00
             CD2 TYR
ATOM
        234
                         26
                                  2.984 -36.335
                                                 -4.286
                                                          1.00
                                                                0.00
             C
                 TYR
ATOM
        235
                                  0.278 - 34.201
                                                 -7.790
                                                          1.00
                                                                0.00
                         26
ATOM
        236
             0
                  TYR
                                  -0.844 -34.641
                                                 -8.036
                         26
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        237
             N
                  GLY
                         27
                                  0.541 - 32.895
                                                 -7.751
                                                          1.00
                                                                0.00
             CA
ATOM
        238
                 GLY
                         27
                                  -0.449 -31.848
                                                 -7.975
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        239
             C
                  GLY
                         27
                                  -0.954 -31.324
                                                  -6.631
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             0
                  GLY
                                  -0.813 -31.995
        240
                         27
                                                  -5.607
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        241
             N
                  GLU
                                  -1.549 -30.125
                                                  -6.622
                                                          1.00
                         28
                                                                0.00
ATOM
        242
             CA
                  GLU
                         28
                                 -2.084 - 29.543
                                                  -5.398
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        243
             CB
                  GLU
                         28
                                 -2.404 -28.049
                                                  -5.582
                                                          1.00
                                                                0.00
             CG
                  GLU
ATOM
         244
                         28
                                  -3.334 -27.733
                                                  -6.764
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         245
             CD
                  GLU
                         28
                                 -3.761 -26.266
                                                  -6.770
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OE1 GLU
ATOM
         246
                         28
                                  -2.926 -25.405
                                                  -6.413
                                                          1.00
                                                                 0.00
         247
             OE2 GLU
                         28
                                 -4.937 -25.995
                                                  -7.087
                                                                 0.00
ATOM
                                                          1.00
ATOM
             С
                  GLU
                                                  -4.918
         248
                         28
                                 -3.282 -30.369
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         249
             0
                  GLU
                         28
                                  -3.901 -31.087
                                                  -5.702
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N
ATOM
         250
                  GLY
                         29
                                  -3.595 -30.284
                                                  -3.623
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CA
                  GLY
ATOM
         251
                         29
                                  -4.690 -31.037
                                                  -3.030
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         252
              C
                  GLY
                                  -4.321 -32.507
                                                  -2.839
                         29
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         253
              0
                  GLY
                         29
                                  -5.160 -33.388
                                                  -3.012
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         254 N
                  ASN
                                  -3.061 -32.761 -2.468 1.00 0.00
                         30
```

					(01)	
	171				172	
ATOM	255	CA	ASN	30	-2.508 -34.086 -2.200 1.00 0.00	
ATOM	256	CB	ASN	30	-1.814 -34.653 -3.449 1.00 0.00	
ATOM	257	CG	ASN	30	-2.781 -34.927 -4.597 1.00 0.00	
ATOM	258	0D1	ASN	30	'-3.400 -35.987 -4.649 1.00 0.00	
ATOM	259	ND2	ASN	30	-2.896 -33.988 -5.533 1.00 0.00	
ATOM	260	C	ASN	30	-1.516 -33.946 -1.045 1.00 0.00	
ATOM	261	0	ASN	30	-0.447 -34.556 -1.052 1.00 0.00	
ATOM	262	N	TRP	31	-1.862 -33.117 -0.052, 1.00 0.00	•
ATOM	263	CA	TRP	31	-1.011 -32.843 1.097 1.00 0.00	
ATOM	264	CB	TRP	31	-1.599 -31.734 1.979 1.00 0.00	
ATOM	265	CG	TRP	31	-2.375 -30.697 1.232 1.00 0.00	
ATOM	266	CD1	TRP	31	-3.703 -30.474 1.343 1.00 0.00	
ATOM	267	NE1	TRP	31	-4.077 -29.461 0.487 1.00 0.00	
ATOM	268	CE2	TRP	31	-3.000 -28.978 -0.220 1.00 0.00	
ATOM	269	CZ2	TRP	31	-2.874 -27.975 -1.191 1.00 0.00	
ATOM	270		TRP	31	-1.611 -27.719 -1.738 1.00 0.00	
ATOM	271		TRP	31	-0.496 -28.458 -1.314 1.00 0.00	
ATOM	272		TRP	31	-0.635 -29.462 -0.338 1.00 0.00	
ATOM	273		TRP	31	-1.893 -29.747 0.235 1.00 0.00	
ATOM	274	С	TRP	31	-0.669 -34.122 1.861 1.00 0.00	
ATOM	275	0	TRP	31	0.397 -34.192 2.462 1.00 0.00	
ATOM	276	N	SER	32	-1.538 -35.137 1.817 1.00 0.00	
ATOM	277	CA	SER	32	-1.312 -36.427 2.453 1.00 0.00	
ATOM	278	CB	SER	32	-2.564 -37.297 2.281 1.00 0.00	
ATOM	279	OG	SER	32	-2.984 -37.317  0.927  1.00  0.00	
ATOM	280	C	SER	32	-0.079 -37.085 1.824 1.00 0.00	
ATOM	281	0	SER	32	0.900 -37.387 2.505 1.00 0.00	
ATOM	282	N	LYS	33	-0.126 -37.289 0.504 1.00 0.00	
ATOM	283	CA	LYS	33	0.964 -37.877 -0.260 1.00 0.00	
ATOM	284	CB	LYS	33	0.595 -37.927 -1.749 1.00 0.00	
ATOM	285	CG	LYS	33	-0.510 -38.951 -2.058 1.00 0.00	
ATOM	286	CD	LYS	33	-0.009 -40.404 -2.037 1.00 0.00	
ATOM	287	CE	LYS	33	0.784 -40.762 -3.304 1.00 0.00	
ATOM	288	NZ	LYS	33	1.466 -42.062 -3.166 1.00 0.00	
ATOM	289	C	LYS	33	2.241 -37.067 -0.046 1.00 0.00	
ATOM	290	0	LYS	33	3.302 -37.638 0.203 1.00 0.00	
ATOM	291		ILE	34	2.136 -35.737 -0.132 1.00 0.00	
ATOM	292	CA	ILE	34	3.268 -34.847 0.062 1.00 0.00	
ATOM	293	CB	ILE	34	2.881 -33.397 -0.290 1.00 0.00	
ATOM	294		ILE	34	4.044 -32.426 -0.043 1.00 0.00	
ATOM	295		ILE	34	2.476 -33.308 -1.776 1.00 0.00	
ATOM	296		ILE	34	1.805 -31.984 -2.148 1.00 0.00	
ATOM	297	С	ILE	34	3.844 -35.038 1.474 1.00 0.00	
ATOM	298	0	ILE	34	5.056 -35.122 1.612 1.00 0.00	
ATOM	299	N	LEU	35	3.020 -35.136 2.523 1.00 0.00	
ATOM	300	CA	LEU	35	3.501 -35.348 3.889 1.00 0.00	
ATOM	301	CB	LEU	35	2.331 -35.411 4.889 1.00 0.00	
ATOM	302	CG	LEU	35	1.795 -34.036 5.306 1.00 0.00	
ATOM	303		LEU	35	0.367 -34.173 5.844 1.00 0.00	
ATOM	304		LEU	35	2.673 -33.406 6.395 1.00 0.00	
A I UIII	304	UDZ	LLLU	55	2.010 00.100 0.000 1.00 0.00	

```
173
                                                                   174
            C
                                                          1.00 0.00
ATOM
        305
                 LEU
                         35
                                  4.301 - 36.647
                                                   3.989
ATOM
        306
             0
                 LEU
                         35
                                  5.375 -36.666
                                                   4.587
                                                          1.00
                                                                0.00
                 LEU
        307
            N
                         36
                                  3.777 -37.737
                                                   3.421
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
ATOM
        308
            CA
                 LEU
                         36
                                  4.434 -39.035
                                                   3.490
                                                          1.00
                                                                0.00
                                                         1.00
             CB
                 LEU
                         36
                                  3.472 -40.143
                                                   3.026
                                                                0.00
ATOM
        309
ATOM
        310 CG
                 LEU
                                  2.639 -40.740
                                                   4.174
                                                         1.00
                                                                0.00
                         36
        311 CD1 LEU
                                                         1.00
                                                                 0.00
                         36
                                  1.738 -39.715
                                                   4.873
ATOM
ATOM
        312 CD2 LEU
                         36
                                  1.771 -41.880
                                                   3.630
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        313
             С
                  LEU
                         36
                                  5.745 -39.080
                                                   2.700 1.00
                                                                0.00
ATOM
        314
             0
                  LEU
                         36
                                  6.777 -39.473
                                                   3.241
                                                         1.00
                                                                 0.00
ATOM
        315 N
                 HIS
                         37
                                  5.706 -38.713
                                                   1.417 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        316 CA HIS
                         37
                                  6.863 -38.776
                                                   0.533
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CB
ATOM
        317
                 HIS
                         37
                                  6.365 -38.894
                                                  -0.911
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        318
             CG
                 HIS
                         37
                                  5.455 -40.079
                                                  -1.127
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             ND1 HIS
                         37
                                  5.875 -41.387
                                                  -0.940
                                                          1.00
                                                                 0.00
        319
ATOM
        320
             CE1 HIS
                         37
                                   4.828 -42.185
                                                  -1.213
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        321
             NE2 HIS
                         37
                                  3.734 -41.507
                                                 -1.570
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        322
             CD2 HIS
                         37
                                   4.138 -40.175
                                                  -1.512
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 HIS
                                  7.845 - 37.611
                                                   0.710
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        323
             С.
                         37
ATOM
        324
             0
                  HIS
                         37
                                   9.055 -37.828
                                                   0.724
                                                          1.00
                                                                 0.00
        325
             N
                  TYR
                         38
                                  7.333 - 36.385
                                                   0.832
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
        326
             CA
                 TYR
                         38
                                   8.105 -35.153
                                                   0.989
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                   7.675 -34.142
                                                  -0.093
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        327
             CB
                  TYR
                         38
ATOM
        328
              CG
                 TYR
                         38
                                   7.974 - 34.551
                                                  -1.521
                                                           1.00
                                                                 0.00
        329
              CD1 TYR
                                   7.119 -35.450
                                                  -2.181
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         38
              CE1 TYR
                                   7.387 -35.839
                                                  -3.503
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         330
                         38
              CZ
                 TYR
                                   8.509 -35.326
                                                  -4.172
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         331
                         38
              OH
                 TYR
                                   8.757 -35.711
                                                  -5.456
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         332
                         38
              CE2 TYR
                                   9.366 -34.424
                                                  -3.521
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         333
                         38
                                   9.100 -34.038
                                                   -2.195
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         334
              CD2 TYR
                         38
             C
                  TYR
                                   7.874 -34.598
                                                   2.397
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         335
                         38
ATOM
              0
                  TYR
                         38
                                   7.293 - 33.529
                                                   2.558
                                                           1.00
                                                                 0.00
         336
ATOM
         337
              N
                  LYS
                         39
                                   8.321 -35.328
                                                   3.423
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  LYS
                                   8.151 -34.939
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         338
              CA
                         39
                                                    4.820
              CB
                  LYS
                                   8.702 -36.038
                                                    5.740
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         339
                          39
              CG
                  LYS
                                  10.220 -36.221
                                                    5.613
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         340
                         39
ATOM
              CD
                  LYS
                          39
                                  10.690 -37.334
                                                    6.556
                                                           1.00
                                                                 0.00
         341
ATOM
         342
              CE
                  LYS
                          39
                                  12.212 -37.505
                                                    6.467
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         343
              NZ
                  LYS
                          39
                                  12.695 -38.564
                                                    7.372
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                                 0.00
ATOM
              C
                  LYS
                                   8.736 -33.561
                                                    5.159
                                                           1.00
         344
                          39
ATOM
         345
              0
                  LYS
                          39
                                   9.628 -33.066
                                                    4.472
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                   8.212 -32.960
 ATOM
              N
                  PHE
                          40
                                                    6.236
                                                           1.00
                                                                 0.00
         346
              CA
                  PHE
                                   8.594 -31.654
                                                    6.765
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         347
                          40
 ATOM
         348
              CB
                  PHE
                          40
                                   7.420 -30.672
                                                    6.619 1.00
                                                                 0.00
                  PHE
 ATOM
         349
              CG
                          40
                                   6.858 - 30.517
                                                    5.223 1.00
                                                                 0.00
              CD1 PHE
                                   5.949 -31.464
                                                           1.00
 ATOM
         350
                          40
                                                    4.723
                                                                 0.00
 ATOM
              CE1 PHE
                                   5.424 -31.325
                                                    3.430
                                                           1.00
                                                                 0.00
         351
                          40
 ATOM
              CZ PHE
                          40
                                   5.806 -30.235
                                                    2.629
                                                           1.00
                                                                 0.00
         352
 ATOM
         353
              CE2 PHE
                          40
                                   6.709 - 29.283
                                                    3.131
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         354
              CD2 PHE
                          40
                                   7.236 -29.423
                                                    4.425
                                                          1.00
                                                                 0.00
```

C ATOM 355 PHE 40 ATOM 0 PHE 40 8.919 -32.890 356 ASN ATOM 357 N 41 9.236 -30.659 CA ASN ATOM 358 41  $9.559 \pm 30.608$ CB ASN ATOM 359 41 10.098 -29.216 10.676 1.00 0.00 ATOM 360 CC ASN 41 10.360 -29.086 12.176 1.00 0.00 OD1 ASN ATOM 361 41 11.170 -29.821 12.731 1.00 0.00 ND2 ASN ATOM 362 41 9.671 -28.159 12.841 1.00 0.00 C ATOM 363 ASN 41 8.332 -30.967 11.165 1.00 0.00 0 ASN 11.881 ATOM 364 41 8.351 -31.964 1.00 0.00 N ASN ATOM 365 42 7.269 -30.154 11.086 1.00 0.00 CA ASN ATOM 366 42 6.040 - 30.37011.844 1.00 0.00 CB ASN ATOM 367 42 6.258 - 29.92413.300 1.00 0.00 ATOM CG ASN 5.026 -30.143 368 42 14.177 1.00 0.00 OD1 ASN ATOM 369 42 4.155 - 30.94713.855 1.00 0.00 ND2 ASN ATOM 370 4.948 -29.427 15.298 1.00 0.00 42 C ASN ATOM 371 42 4.883 -29.617 11.182 1.00 0.00 0 ASN ATOM 372 4.417 -28.606 11.704 1.00 0.00 42 ATOM 373 N ARG 43 4.435 -30.109 10.020 1.00 0.00 ATOM CA ARG 3.349 -29.562 374 43 9.214 1.00 0.00 375 CB ARG 3.859 ,-29.273 1.00 0.00 ATOM 43 7.791 CG ARG ATOM 376 4.465 -27.875 7.606 1.00 0.00 43 **ATOM** CD ARG 377 43 5.591 -27.538 8.589 1.00 0.00 ATOM 378 NE ARG 43 6.105 -26.176 8.400 1.00 0.00 ATOM 379 CZ ARG 5.517 -25.056 1.00 43 8.853 0.00 ATOM 380 NH1 ARG 6.193 -23.909 1.00 0.00 43 8.770 ATOM 381 NH2 ARG 43 4.288 -25.096 9.387 1.00 0.00 C ATOM 382 ARG 43 2.210 -30.583 9.160 1.00 0.00 0 ARG 2.401 -31.752 ATOM 383 43 9.492 1.00 0.00 N THR 1.029 -30.130 0.00 **ATOM** 384 44 8.728 1.00 385 ATOM CA THR -0.175 -30.9348.577 1.00 0.00 44 ATOM 386 CB THR 44 -1.171 -30.6469.717 1.00 0.00 CG2 THR ATOM 387 44 -0.518 -30.68911.102 1.00 0.00 OG1 THR -1.799 - 29.389ATOM 388 44 9.520 1.00 0.00 ATOM 389 C THR -0.829 -30.5691.00 44 7.249 0.00 ATOM 390 0 THR -0.431 - 29.5936.611 1.00 0.00 44 ATOM N SER 391 45 -1.856 -31.3296.852 1.00 0.00 ATOM 392 ČA SER 45 -2.612 -31.060 5.639 1.00 0.00 ATOM 393 CBSER -3.764 - 32.0615.519 1.00 0.00 45 ATOM 394 0G SER 45 -3.251 -33.368 5.401 1.00 0.00 ATOM 395 C SER -3.150 -29.630 45 5.676 1.00 0.00 0 SER ATOM 396 45 -3.158 - 28.9494.655 1.00 0.00 ATOM 397 N VAL 46 -3.584 -29.175 6.858 1.00 0.00 ATOM 398 CA VAL -4.103 -27.833 1.00 0.00 46 7.061 ATOM 399 CB VAL 46 -4.732 -27.6948.460 1.00 0.00 CG1 VAL ATOM 400 46 -5.342 -26.300 8.634 1.00 0.00 ATOM 401 CG2 VAL 46 -5.843 - 28.7248.692 1.00 0.00 VAL 402 C -2.984 -26.812 ATOM 46 6.833 1.00 0.00 ATOM 403 0 VAL 46 -3.162 -25.892 6.038 1.00 0.00

175

ATOM

404 N

MET

47

-1.839 -26.968

7.516 1.00 0.00

```
177
                                                                   178
ATOM
        405
             CA
                 MET
                         47
                                 -0.729 - 26.028
                                                   7.360 1.00 0.00
ATOM
        406
             CB
                 MET
                         47
                                  0.458 - 26.359
                                                   8.287
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             CG
                  MET
        407
                         47
                                  0.095 - 26.610
                                                   9.757 1.00
                                                                 0.00
             SD
                  MET
ATOM
        408
                         47
                                 -1.240 -25.606
                                                  10.467 1.00
                                                                 0.00
             CE
                 MET
ATOM
        409
                         47
                                 -1.308 - 26.341
                                                  12.118
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C
                  MET
ATOM
        410
                         47
                                 -0.296 -25.924
                                                   5.890
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        411
             0
                  MET
                         47
                                 -0.097 -24.824
                                                   5.376
                                                          1.00
                                                                 0.00
        412 N
                  LEU
ATOM
                         48
                                 -0.165 -27.070
                                                   5.212 1.00
                                                                 0.00
             CA
                 LEU
ATOM
        413
                         48
                                  0.222 - 27.156
                                                   3.808 1.00
                                                                 0.00
                 LEU
                                  0.387 -28.631
ATOM
        414
             CB
                         48
                                                   3.412 1.00
                                                                 0.00
             CG LEU
ATOM
        415
                         48
                                  1.633 -29.240
                                                   4.069
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        416
             CD1 LEU
                         48
                                  1.538 -30.764
                                                    4.148 1.00
                                                                 0.00
             CD2 LEU
ATOM
        417
                         48
                                   2.896 -28.903
                                                   3.275 1.00 0.00
ATOM
        418
             C
                  LEU
                         48
                                  -0.806 -26.460
                                                    2.918
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        419
             0
                  LEU
                                  -0.441 -25.631
                                                    2.084
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         48
ATOM
        420
             N
                  LYS
                         49
                                  -2.087 - 26.795
                                                    3.105
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        421
             CA
                  LYS
                         49
                                  -3.197 -26.221
                                                    2.362
                                                           1.00 0.00
ATOM
        422
             CB
                 LYS
                         49
                                  -4.519 -26.797
                                                    2.898
                                                           1.00
                                                                 0.00
             CG
ATOM
        423
                  LYS
                         49
                                  -5.784 - 26.211
                                                    2.246
                                                           1.00
                                                                 0.00
             CD
                  LYS
ATOM
        424
                         49
                                  -6.819 -25.762
                                                    3.292
                                                           1.00
                                                                 0.00
        425
             CE
                 LYS
                                  -6.376 - 24.520
                                                                 0.00
ATOM
                         49
                                                    4.064
                                                           1.00
ATOM
         426
             NZ
                  LYS
                          49
                                  -7.419 -23.989
                                                    4.965
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        427
             C
                  LYS
                                  -3.152 -24.697
                                                    2.469
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          49
             0
                  LYS
ATOM
         428
                          49
                                  -3.150 -24.015
                                                    1.448
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         429
              N
                  ASP
                                  -3.118 -24.159
                                                    3.694
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          50
              CA
ATOM
         430
                 ASP
                          50
                                  -3.091 -22.720
                                                    3.915
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CB
ATOM
                  ASP
                                  -3.241 - 22.384
                                                    5.401
                                                           1.00
                                                                 0.00
         431
                          50
              CG
                 ASP
                                  -4.673 -22.596
                                                                 0.00
ATOM
         432
                          50
                                                    5.877
                                                           1.00
ATOM
              OD1 ASP
                                  -4.883 -23.496
                                                          1.00
                                                                 0.00
         433
                          50
                                                    6.716
ATOM
         434
              OD2 ASP
                          50
                                  -5.564 -21.859
                                                    5.391
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                  -1.848 -22.076
ATOM
         435
              C
                  ASP
                                                    3.307
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          50
              0
                  ASP
                                  -1.974 -21.050
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         436
                          50
                                                    2.647
ATOM
         437
              N
                  ARG
                                  -0.657 -22.657
                                                    3.507
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          51
ATOM
         438
              CA
                  ARG
                                   0.569 - 22.101
                                                    2.944 1.00
                                                                  0.00
                          51
                                   1.788 -22.960
ATOM
         439
              CB
                  ARG
                                                    3.315
                                                          1.00
                                                                  0.00
                          51
ATOM
              CG
                  ARG
                                   3.091 -22.465
                                                           1.00
                                                                  0.00
         440
                          51
                                                    2.657
ATOM
              CD
                  ARG
                                   3.512 -21.085
                                                    3.173
                                                           1.00
                                                                  0.00
         441
                          51
ATOM
         442
              NE
                  ARG
                          51
                                   4.856 - 20.707
                                                    2.706
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         443
              CZ
                  ARG
                          51
                                   5.384 - 19.471
                                                    2.771
                                                           1.00
                                                                  0.00
              NH1 ARG
                                   4.674 -18.447
                                                    3.252
                                                           1.00
ATOM
         444
                          51
                                                                  0.00
ATOM
         445
              NH2 ARG
                          51
                                   6.638 -19.249
                                                    2.366
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  ARG
              C
                                   0.447 -21.975
                                                    1.427
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         446
                          51
         447
              0
                  ARG
                          51
                                   0.596 - 20.878
                                                    0.885
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
ATOM
                  TRP
                                   0.182 -23.094
                                                           1.00
                                                                  0.00
         448
              N
                          52
                                                    0.742
              CA
                  TRP
                                                   -0.704
ATOM
         449
                          52
                                   0.060 - 23.096
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              CB
                  TRP
                                  -0.170 -24.512
                                                   -1.227
         450
                          52
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              CG TRP
                          52
                                  -0.147 -24.600
                                                   -2.721
                                                           1.00
                                                                  0.00
         451
              CD1 TRP
                          52
ATOM
         452
                                  -1.232 -24.569
                                                   -3.524
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
              NE1 TRP
                                                                  0.00
         453
                          52
                                  -0.844 -24.672
                                                   -4.841
                                                           1.00
 ATOM
              CE2 TRP
                          52
                                   0.527 -24.769 -4.956 1.00
         454
                                                                 0.00
```

	170				(31)			100
1 more	179	070	TDD.	50	1 000 04 007	0.054	1 00	180
ATOM	455		TRP ·		1.392 -24.887		1.00	0.00
ATOM	456		TRP		2.776 -24.972		1.00	0.00
ATOM	457	CZ3		52	3.273 -24.936	-4.515	1.00	0.00
ATOM	458	CE3		52	2.396 -24.813	-3.421	1.00	0.00
ATOM	459	CD2		52	1.001 -24.727	-3.611	1.00	0.00
ATOM	460	C	TRP	52	-1.056 -22.164	-1.167	1.00	0.00
ATOM	461	0	TRP	52	-0.895 -21.479	-2.169	1.00	0.00
ATOM	462	N	ARG	53	-2.182 -22.135	-0.450	1.00	0.00
ATOM	463	CA	ARG	53	-3.316 -21.292	-0.786	1.00	0.00
ATOM	464	CB	ARG	53	-4.481 -21.618	0.147	1.00	0.00
ATOM	465	CG	ARG	53	-5.716 -20.785	-0.195	1.00	0.00
ATOM	466	CD	ARG	53	-6.942 -21.349	0.522	1.00	0.00
ATOM	467	NE	ARG	53 ·	-6.855 -21.207	1.986	1.00	0.00
ATOM	468	CZ	ARG	53	-7.927 -21.079	2.784	1.00	0.00
ATOM	469	NH1	ARG	53	-7.772 -20.842	4.092	1.00	0.00
ATOM	470	NH2	ARG	53	-9.158 -21.192	2.274	1.00	0.00
ATOM	471	C	ARG	53	-2.935 -19.812	-0.741	1.00	0.00
ATOM	472	0	ARG	53	-3.196 -19.088	-1.699	1.00	0.00
ATOM	473	N	THR	54	-2.320 -19.358	0.355	1.00	0.00
ATOM	474	CA	THR	54	-1.892 -17.975	0.512	1.00	0.00
ATOM	475	CB	THR	54	-1.291 -17.766	1.910	1.00	0.00
ATOM	476	CG2	THR	54	-0.820 -16.321	2.107	1.00	0.00
ATOM	477	0G1	THR	54	-2.271 -18.057	2.885	1.00	0.00
ATOM	478	C	THR	54	-0.891 -17.628	-0.589	1.00	0.00
ATOM	479	0	THR	54	-1.043 -16.614	-1.268	1.00	0.00
ATOM	480	N	MET	55	0.126 -18.480	-0.766	1.00	0.00
ATOM	481	CA	MET	55	1.153 -18.290	-1.776	1.00	0.00
ATOM	482	СВ	MET	55	2.169 -19.437	-1.699	1.00	0.00
ATOM	483	CG	MET		3.442 -19.108	-2.491	1.00	0.00
ATOM	484	SD	MET	55	4.695 -20.416	-2.528	1.00	0.00
ATOM	485	CE	MET	55	3.850 -21.608	-3.590	1.00	0.00
ATOM	486	С	MET	55	0.522 -18.183	-3.166	1.00	0.00
ATOM	487	0	MET	55	0.880 -17.302	-3.936	1.00	0.00
ATOM	488	N	LYS	56	-0.417 -19.072	-3.492	1.00	0.00
ATOM	489	CA	LYS	56	-1.113 -19.104	-4.768	1.00	0.00
ATOM	490	CB	LYS	56	-2.007 -20.354	-4.817	1.00	0.00
ATOM	491	CG	LYS	56	-2.837 -20.455	-6.106	1.00	0.00
ATOM	492	CD	LYS	56	-3.390 -21.871	-6.332	1.00	0.00
ATOM	493	CE	LYS	56	-4.330 -22.333	-5.210	1.00	0.00
ATOM	494	NZ	LYS	56	-4.859 -23.684	-5.473	1.00	0.00
ATOM	495	C	LYS	56	-1.918 -17.825	-4.984	1.00	0.00
ATOM	496	0	LYS	56	-1.794 -17.187	-6.025	1.00	0.00
ATOM	497	N	LYS	57	-2.753 -17.463	-4.009	1.00	0.00
ATOM	498	CA	LYS	57	-3.617 -16.296	-4.073	1.00	0.00
ATOM	499	CB	LYS	57	-4.516 -16.275	-2.824	1.00	0.00
ATOM	500	CG	LYS	57	-5.543 -15.132	-2.871	1.00	0.00
ATOM	501	CD	LYS	57	-6.360 -15.010	-1.576	1.00	0.00
ATOM	502	CE	LYS	57	-7.298 -16.203	-1.348	1.00	0.00
ATOM	503	NZ	LYS	57	-8.205 -15.973	-0.206	1.00	0.00
ATOM	504	C	LYS	57	-2.838 -14.985	-4.216	1.00	0.00
,,,,	501	J	210	٠,	2.000 11.000			0.00

```
181
                                                                  182
        505 0
ATOM
                 LYS
                        57
                                 -3.136 -14.194 -5.107
                                                        1.00 0.00
ATOM
        506
            N
                 LEU
                        58
                                 -1.882 -14.739
                                                -3.316
                                                         1.00 0.00
        507 CA
                 LEU
ATOM
                        58
                                 -1.128 -13.494 -3.269
                                                         1.00
        508
            CB
                 LEU
                                 -0.867 -13.126 -1.799
ATOM
                        58
                                                         1.00
                                                               0.00
             CG LEU
ATOM
        509
                        58
                                 -2.144 -13.065 -0.939
                                                         1.00
                                                               0.00
             CD1 LEU
ATOM
        510
                        58
                                 -1.762 -12.742
                                                  0.508
                                                         1.00
                                                               0.00
            CD2 LEU
                                                               0.00
ATOM
        511
                        58
                                 -3.129 -12.001 -1.440
                                                         1.00
ATOM
        512
             C
                 LEU
                        58
                                 0.181 - 13.518 - 4.058
                                                         1.00
                                                               0.00
            0
                 LEU
ATOM
        513
                        58
                                 0.380 -12.693 -4.946
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        514 N
                 LYS
                                 1.093 -14.431 -3.716
                        59
                                                         1.00
                                                               0.00
        515 CA LYS
ATOM
                        59
                                 2.410 -14.504 -4.336
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        516 CB
                 LYS
                                 3.354 -15.315 -3.435
                                                         1.00
                        59
                                                               0.00
             CG
                LYS
                        59
ATOM
        517
                                  4.810 -14.860 -3.594
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        518
             CD
                 LYS
                        59
                                  5.762 -15.554 -2.607
                                                         1.00
                                                               0.00
                 LYS
ATOM
        519
             CE
                        59
                                  5.377 -15.401 -1.125
                                                         1.00
                                                               0.00
             NZ
                 LYS
                                  5.088 -14.002 -0.749
ATOM
        520
                        59
                                                         1.00
                                                               0.00
             C
                 LYS
ATOM
        521
                        59
                                  2.390 -15.004 -5.786
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        522
             0
                 LYS
                                  3.260 -14.619 -6.563
                                                               0.00
                        59
                                                         1.00
ATOM
        523
             N
                 LEU
                        60
                                  1.420 -15.853
                                                 -6.144
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        524
             CA
                 LEU
                        60
                                  1.249 -16.433 -7.467
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        525
             CB
                 LEU
                        60
                                  0.911 -15.356
                                                -8.515 1.00
                                                               0.00
ATOM
             CG LEU
                        60
                                 -0.430 -14.655
                                                 -8.234
                                                         1.00
                                                               0.00
        526
             CD1 LEU
ATOM
        527
                        60
                                 -0.425 -13.256
                                                 -8.856
                                                         1.00
                                                               0.00
             CD2 LEU
                                                -8.816
ATOM
        528
                        60
                                 -1.600 -15.457
                                                         1.00
                                                               0.00
             C
                 LEU
                                  2.469 -17.271 -7.834 1.00
ATOM
        529
                        60
                                                               0.00
ATOM
        530
             0
                 LEU
                                  3.238 -16.903
                                                 -8.717 1.00
                                                               0.00
                        60
ATOM
        531
             N
                 ILE
                        61
                                  2.594 -18.402
                                                 -7.125
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        532
             CA
                 ILE
                                  3.604 -19.457
                                                 -7.189
                                                         1.00
                                                               0.00
                        61
             CB
                 ILE
ATOM
        533
                        61
                                  2.921 - 20.778
                                                -7.596
                                                         1.00
                                                              0.00
ATOM
        534
             CG2 ILE
                                  3.914 -21.945
                                                 -7.704
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
             CG1 ILE
        535
                         61
                                  1.803 -21.179
                                                 -6.614
                                                         1.00
                                                                0.00
             CD1 ILE
                                                 -7.358
                                                                0.00
ATOM
        536
                                  0.479 - 21.347
                                                         1.00
                 ILE
ATOM
        537
             C
                                  4.825 -19.135
                                                 -8.058
                                                         1.00
                                                                0.00
                         61
ATOM
        538
             0
                 ILE
                         61
                                  5.892 -18.868
                                                -7.509
                                                         1.00
                                                                0.00
                 SER
ATOM
        539
             N
                         62
                                  4.659 -19.193 -9.387
                                                         1.00
                                                                0.00
                 SER
ATOM
        540
             CA
                         62
                                  5.669 -18.958 -10.413
                                                         1.00
                                                                0.00
                 SER
ATOM
        541
             CB
                         62
                                  6.120 -17.488 -10.457
                                                         1.00
                                                                0.00
             0G
                 SER
                         62
                                  7.015 -17.179 -9.412 1.00
                                                                0.00
ATOM
        542
ATOM
        543
             C
                 SER
                         62
                                  6.832 -19.948 -10.325
                                                         1.00
                                                                0.00
                 SER
ATOM
        544
             0
                         62
                                  6.929 -20.734 -9.382
                                                         1.00
                                                                0.00
             N
                 SER
                                  7.715 -19.924 -11.324
ATOM
        545
                         63
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        546
             CA
                 SER
                         63
                                  8.869 -20.803 -11.409
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        547
             CB
                 SER
                         63
                                  8.399 -22.235 -11.721
                                                         1.00
                                                                0.00
             0G
                 SER
ATOM
        548
                         63
                                  9.459 -23.158 -11.581
                                                         1.00
                                                                0.00
             C
                  SER
ATOM
        549
                         63
                                  9.785 -20.279 -12.515
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        550
             0
                  SER
                         63
                                  9.620 -19.150 -12.981
                                                         1.00
                                                                0.00
             N
                  ASP
                                 10.730 -21.118 -12.944
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        551
                         64
ATOM
             CA
                 ASP
                                 11.660 -20.824 -14.019
                                                                0.00
        552
                         64
                                                         1.00
ATOM
        553
             CB
                 ASP
                         64
                                 12.834 -21.813 -13.914 1.00
                                                                0.00
ATOM
        554 CG ASP
                                 14.046 -21.462 -14.773 1.00 0.00
                         64
```

```
183
                                                                    184
ATOM
             OD1 ASP
                                 14.056 -20.350 -15.348
                                                          1.00 0.00
        555
                         64
ATOM
             OD2 ASP
                                 14.954 -22.318 -14.835
                                                          1.00
                                                                 0.00
        556
                         64
ATOM
        557
             C
                  ASP
                         64
                                  10.908 -20.934 -15.355
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        558
             0
                  ASP
                                  9.710 -21.223 -15.379
                                                          1.00
                         64
                                                                 0.00
                                                          1.00
ATOM
        559
             N
                  SER
                         65
                                  11.598 -20.704 -16.473
                                                                 0.00
ATOM
             CA
                  SER
                                  11.031 -20.766 -17.810
                                                          1.00
        560
                         65
                                                                 0.00
ATOM
        561
             CB
                  SER
                         65
                                  11.971 -20.041 -18.781
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        562
             OG.
                  SER
                                  12.159 -18.705 -18.359
                                                          1.00
                         65
                                                                 0.00
ATOM
        563
             C
                  SER
                         65
                                  10.768 -22.209 -18.255
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        564
             0
                  SER
                                  11.434 -22.711 -19.156
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         65
ATOM
        565
             N
                  GLU
                         66
                                  9.785 -22.869 -17.632
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  GLU
ATOM
        566
             CA
                         66
                                  9.385 -24.231 -17.955
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         567
             CB
                  GLU
                         66
                                   8.591 -24.830 -16.779
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CG
                  GLU
        568
                         66
                                   9.454 -25.018 -15.524
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        569
              CD
                 GLU
                                   8.665 -25.657 -14.384
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        570
              OE1 GLU
                         66
                                   8.168 -26.786 -14.596
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        571
             OE2 GLU
                         66
                                   8.576 -25.026 -13.311
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C
                  GLU
ATOM
        572·
                                   8.551 -24.207 -19.242
                                                           1.00
                         66
                                                                 0.00
             0
                  GLU-
ATOM
         573
                                   7.327 -24.326 -19.188
                                                           1.00
                                                                 0.00
              N
                  ASP
ATOM
         574
                         67
                                   9.216 -24.041 -20.392
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         575
              CA
                  ASP
                         67
                                   8.579 -23.989 -21.702
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CB
                  ASP
         576
                                   9.449 -23.183 -22.681
                                                           1.00
                         67
                                                                 0.00
                                  10.791 -23.841 -22.997
ATOM
         577
              CG
                  ASP
                         67
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              OD1 ASP
                                  11.026 -24.118 -24.194
         578
                         67
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OD2 ASP
ATOM
         579
                         67
                                  11.581 -24.015 -22.043
                                                          1.00
                                                                 0.00
              C
                  ASP
ATOM
         580
                                   8.252 -25.387 -22.242
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         67
ATOM
             OT1 ASP
                                   8.602 -26.373 -21.555
         581
                         67
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         582
              OT2 ASP
                                   7.418 -25.433 -23.173
                         67
                                                           1.00
                                                                 0.00
              05' GUA
ATOM
         583
                         68
                                  -7.585 -39.805
                                                  11.034
                                                          1.00
                                                                 0.00
              C5' GUA
ATOM
         584
                         68
                                  -7.255 -40.712
                                                   10.003
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C4'
                  GUA
         585
                         68
                                  -7.381 - 40.030
                                                    8.637
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         586
              04'
                  GUA
                         68
                                  -8.671 - 39.477
                                                    8.475
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         587
              C1'
                  GUA
                         68
                                  -8.608 -38.428
                                                    7.532 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         588
              N9
                  GUA
                         68
                                  -9.779 -37.547
                                                    7.727
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  GUA
ATOM
         589
              68
                         68
                                 -10.256 -37.041
                                                    8.909
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              N7
                  GUA
                                 -11.387 -36.401
         590
                          68
                                                    8.802 1.00
                                                                 0.00
                  GUA
ATOM
         591
              C5
                                 -11.675 -36.469
                                                           1.00
                          68
                                                    7.443
                                                                 0.00
ATOM
         592
              C6
                  GUA
                          68
                                 -12.793 -35.960
                                                    6.715 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         593
              06
                  GUA
                                 -13.796 -35.405
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          68
                                                    7.156
ATOM
         594
              N1
                  GUA
                          68
                                 -12.666 -36.157
                                                    5.346
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C2
                  GUA
                                 -11.617 -36.824
         595
                          68
                                                    4.745 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         596
              N2
                  GUA
                          68
                                 -11.624 -36.922
                                                    3.414 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         597
              N3
                  GUA
                          68
                                 -10.595 -37.355
                                                    5.431
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C4
                  GUA
         598
                          68
                                 -10.678 -37.137
                                                    6.771
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         599
              C3'
                  GUA
                                  -6.395 -38.868
                                                    8.441
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          68
ATOM
         600
              C2'
                  GUA
                          68
                                  -7.307 -37.746
                                                    7.923
                                                           1.00
                                                                 0.00
         601
              03'
                  GUA
                                  -5.415 -39.300
                                                                 0.00
ATOM
                          68
                                                    7.505
                                                          1.00
              P
                  THY
ATOM
         602
                          69
                                  -4.181 -38.378
                                                    7.006
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         603
              OP1 THY
                          69
                                  -3.261 - 39.227
                                                    6.218
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              OP2 THY
                                  -3.671 -37.610
         604
                          69
                                                    8.162 1.00
                                                                 0.00
```

```
185
                                                                   186
ATOM
        605
             05'
                 THY
                                 -4.895 -37.355
                                                   5.989
                                                          1.00 0.00
                         69
ATOM
        606
             C5'
                 THY
                         69
                                 -5.708 -37.831
                                                   4.933
                                                          1.00 0.00
             C4'
                 THY
                                 -6.630 -36.735
                                                   4.388
                                                          1.00
ATOM
        607
                         69
                                                                0.00
                                                          1.00
             04'
                 THY
ATOM
        608
                         69
                                 -7.663 -36.267
                                                   5.219
                                                                 0.00
             C1' THY
                                 -8.110 -35.044
                                                   4.679 1.00
                                                                0.00
ATOM
        609
                         69
        610 N1
                 THY
                                 -9.012 -34.363
                                                   5.642 1.00
ATOM
                         69
                                                                 0.00
                                                          1.00
ATOM
        611
             6
                 THY
                         69
                                 -8.711 -34.367
                                                   6.983
                                                                 0.00
        612 C5
                 THY
                                 -9.545 -33.801
                                                   7.890 1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         69
             C7
                 THY
                                 -9.090 -33.830
                                                   9.337 1.00
ATOM
        613
                         69
                                                                0.00
                 THY
                                -10.804 -33.203
                                                         1.00
ATOM
        614
             C4
                         69
                                                   7.491
                                                                 0.00
                                                          1.00
                  THY
                                -11.630 -32.689
ATOM
        615
             04
                         69
                                                   8.240
                                                                 0.00
                                                          1.00
ATOM
        616
            N3
                 THY
                         69
                                -11.041 -33.253
                                                   6.128
                                                                 0.00
             C2
                 THY
                                -10.196 -33.792
                                                   5.172 1.00
ATOM
        617
                         69
                                                                 0.00
                                                                 0.00
ATOM
        618
             02
                 THY
                         69
                                -10.504 -33.754
                                                   3.983
                                                          1.00
ATOM
        619
             C3'
                 THY
                                 -5.894 -35.468
                                                   3.937
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         69
ATOM
        620
             C2'
                 THY
                         69
                                 -6.770 -34.342
                                                   4.499
                                                          1.00
                                                                 0.00
             03'
ATOM
        621
                  THY
                         69
                                 -5.768 -35.432
                                                   2.527
                                                          1.00
                                                                 0.00
             P
                  THY
ATOM
        622
                         70
                                  -4.867 -34.309
                                                   1.805
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OP1 THY
ATOM
        623
                         70
                                  -4.226 -34.913
                                                   0.615
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP2 THY
ATOM
        624
                         70
                                  -4.005 -33.708
                                                   2.841
                                                           1.00
                                                                 0.00
             05' THY
                                  -5.925 -33.185
ATOM
        625
                         70
                                                    1.347
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        626
             C5' THY
                         70
                                  -6.905 -33.430
                                                    0.354
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C4'
                 THY
                                  -8.017 -32.379
                                                    0.459
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        627
                         70
ATOM
        628
             04'
                  THY
                         70
                                  -8.536 -32.367
                                                    1.773
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        629
              C1'
                  THY
                         70
                                  -9.237 -31.160
                                                    1.947
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        630
              N1
                  THY
                         70
                                  -9.456 -30.869
                                                    3.386
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
              60
                                  -8.425 -31.020
                                                    4.281
                                                           1.00
                                                                 0.00
        631
                         70
                                                                 0.00
ATOM
        632
              C5
                  THY
                         70
                                  -8.600 -30.766
                                                    5.600
                                                           1.00
                  THY
                                                          1.00
ATOM
         633
              C7
                                  -7.379 -30.971
                                                    6.474
                                                                 0.00
                         70
ATOM
         634
             C4
                  THY
                         70
                                  -9.879 -30.326
                                                    6.125
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                                 0.00
         635
              04
                  THY
                                 -10.122 -30.050
                                                    7.299
                                                           1.00
ATOM
                         70
              N3
                  THY
                                 -10.874 -30.237
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         636
                         70
                                                    5.169
              C2
                                 -10.713 -30.435
                                                    3.806
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         637
                  THY
                         70
              02
                  THY
                         70
                                 -11.636 -30.196
                                                    3.033
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         638
              C3' THY
                                  -7.554 -30.934
ATOM
         639
                         70
                                                    0.227
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C2'
                  THY
ATOM
         640
                         70
                                  -8.309 -30.135
                                                    1.299
                                                           1.00
                                                                 0.00
              03'
                  THY
                                  -7.855 -30.503
                                                   -1.090
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         641
                         70
ATOM
         642
             P
                  ADE
                         71
                                  -7.432 -29.038
                                                   -1.626
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         643
              OP1 ADE
                         71
                                  -6.200 -28.621
                                                   -0.919
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OP2 ADE
ATOM
         644
                                  -7.465 -29.047
                                                   -3.103
                                                           1.00
                                                                  0.00
                         71
ATOM
         645
              05' ADE
                          71
                                  -8.604 -28.085
                                                   -1.101
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C5'
                  ADE
                                  -9.923 -28.140
                                                           1.00
ATOM
         646
                          71
                                                   -1.600
                                                                  0.00
              C4' ADE
                                 -10.780 -27.131
                                                   -0.824
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         647
                          71
                                 -11.071 -27.602
         648
              04'
                 ADE
                                                    0.494
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
                          71
ATOM
         649
              C1' ADE
                         71
                                 -10.907 - 26.526
                                                    1.395
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              N9
                  ADE
                                 -10.714 - 26.920
                                                    2.810
                                                           1.00
                                                                  0.00
         650
                          71
              С8
                  ADE
                                  -9.582 -27.445
                                                    3.369
                                                                  0.00
ATOM
         651
                          71
                                                           1.00
                                                           1.00
              N7
                                  -9.569 -27.496
                                                                  0.00
ATOM
         652
                  ADE
                          71
                                                    4.667
 ATOM
         653
              C5
                  ADE
                          71
                                 -10.814 -26.989
                                                    5.001
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                 -11.424 -26.758
 ATOM
         654
              C6
                 ADE
                          71
                                                    6.243 1.00 0.00
```

```
187
                                                                    188
ATOM
                  ADE
                         71
                                 -10.808 -27.068
                                                    7.381
                                                            1.00 0.00
        655
              N6
              N1
                  ADE
                         71
                                 -12.635 -26.174
                                                    6.274
                                                           1.00 0.00
ATOM
        656
ATOM
              C2
                  ADE
                          71
                                 -13.219 -25.861
                                                    5.117
                                                           1.00
                                                                  0.00
         657
              N3
                  ADE
                          71
                                 -12.754 -26.037
                                                    3.881
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         658
         659
                  ADE
                                                            1.00
ATOM
              C4
                          71
                                 -11.524 -26.621
                                                    3.887
                                                                  0.00
              C3'
                  ADE
ATOM
         660
                          71
                                 -10.042 -25.789
                                                   -0.637
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C2'
                  ADE
                                  -9.617 -25.948
                                                    0.819
                                                            1.00
ATOM
         661
                          71
                                                                  0.00
                                                           1.00
ATOM
         662
              03'
                  ADE
                          71
                                 -10.974 -24.745
                                                   -0.799
                                                                  0.00
              P
                  GUA
                                 -10.580 -23.186
                                                   -0.882
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         663
                          72
                                                            1.00
              OP1 GUA
                                 -10.511 -22.771
                                                   -2.300
                                                                  0.00
ATOM
         664
                          72
              OP2 GUA
                                  -9.465 -22.873
                                                    0.045
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         665
                          72
              05' GUA
                                 -11.889 -22.565
                                                   -0.213
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         666
                          72
ATOM
         667
              C5'
                  GUA
                          72
                                 -13.198 -22.920
                                                   -0.610
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
              C4'
                  GUA
                                 -14.146 -22.461
                                                            1.00
                                                                  0.00
         668
                          72
                                                    0.499
                                                           1.00
              04'
                  GUA
                          72
                                 -13.823 -23.132
                                                     1.712
                                                                  0.00
ATOM
         669
ATOM
         670
              C1'
                  GUA
                          72
                                 -13.489 -22.218
                                                     2.744
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         671
              N9
                  GUA
                          72
                                  -12.360 -22.746
                                                     3.555
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         672
              68
                  GUA
                          72
                                  -11.163 -23.243
                                                     3.110
                                                            1.00
                                                                  0.00
                                  -10.320 -23.589
                                                            1.00
ATOM
         673
              N7
                   GUA
                          72
                                                     4.046
                                                                  0.00
              C5
                  GUA
                          72
                                  -11.040 -23.360
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         674
                                                     5.214
              C6
                   GUA
                          72
                                  -10.686 -23.624
                                                            1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         675
                                                     6.570
 ATOM
         676
              06
                   GUA
                          72
                                  -9.625 -24.081
                                                     6.992
                                                            1.00
                                                                   0.00
 ATOM
         677
              N1
                   GUA
                          72
                                  -11.708 -23.308
                                                     7.459
                                                            1.00
                                                                   0.00
              C2
: ATOM
         678
                   GUA
                          72
                                  -12.933 - 22.787
                                                     7.087
                                                            1.00
                                                                   0.00
              N2
 ATOM
         679
                   GUA
                          72
                                  -13.796 - 22.471
                                                     8.053
                                                            1.00
                                                                   0.00
ATOM
         680
              N3
                   GUA
                          72
                                  -13.264 -22.529
                                                     5.814
                                                            1.00
                                                                   0.00
 ATOM
              C4
                   GUA
                          72
                                  -12.287 -22.846
                                                            1.00
                                                                   0.00
         681
                                                     4.925
              C3'
                   GUA
 ATOM
         682
                          72
                                  -13.973 - 20.964
                                                     0.758
                                                            1.00
                                                                   0.00
         683
              C2'
                  GUA
                          72
                                  -13.074 -20.957
                                                     1.994
                                                            1.00
                                                                   0.00
 ATOM
              03'
                   GUA
 ATOM
         684
                          72
                                  -15.244 - 20.378
                                                     0.958
                                                            1.00
                                                                   0.00
 ATOM
         685
              P
                   GUA
                          73
                                  -15.442 -18.780
                                                     1.070
                                                            1.00
                                                                   0.00
 ATOM
              OP1 GUA
                                  -16.832 -18.454
                                                            1.00
         686
                          73
                                                     0.687
                                                                   0.00
 ATOM
         687
              OP2 GUA
                          73
                                  -14.310 -18.108
                                                     0.393
                                                            1.00
                                                                   0.00
              05' GUA
·ATOM
         688
                          73
                                  -15.285 -18.560
                                                     2.650
                                                            1.00
                                                                   0.00
 ATOM
              C5'
                   GUA
                                  -16.238 -19.088
                                                            1.00
                                                                   0.00
         689
                          73
                                                     3.550
 ATOM
         690
              C4'
                   GUA
                          73
                                  -15.732 -18.918
                                                     4.980
                                                            1.00
                                                                   0.00
              04'
                   GUA
 ATOM
         691
                          73
                                  -14.499 - 19.593
                                                     5.149
                                                            1.00
                                                                   0.00
              C1'
                   GUA
                                  -13.729 -18.868
                                                                   0.00
 ATOM
         692
                          73
                                                     6.079
                                                            1.00
              N9
                   GUA
 ATOM
         693
                                  -12.310 -19.285
                                                     6.007
                                                            1.00
                                                                   0.00
                          73
 ATOM
         694
               68
                   GUA
                          73
                                  -11.488 -19.353
                                                     4.910
                                                            1.00
                                                                   0.00
                   GUA
 ATOM
               N7
                          73
                                  -10.328 -19.914
                                                     5.129
                                                            1.00
                                                                   0.00
         695
         696
               C5
                   GUA
                          73
                                  -10.371 -20.202
                                                     6.489
                                                            1.00
                                                                   0.00
 ATOM
                   GUA
                                   -9.400 -20.831
                                                            1.00
 ATOM
         697
               C6
                          73
                                                     7.318
                                                                   0.00
 ATOM
         698
               06
                   GUA
                          73
                                   -8.303 -21.264
                                                     6.976
                                                            1.00
                                                                   0.00
                                   -9.824 -20.968
 ATOM
         699
               N1
                   GUA
                          73
                                                     8.635
                                                            1.00
                                                                   0.00
         700
               C2
                   GUA
                          73
                                  -11.051 -20.548
                                                     9.104
                                                            1.00
                                                                   0.00
 ATOM
               N2
                   GUA
 ATOM
         701
                          73
                                  -11.316 -20.723
                                                    10.398
                                                            1.00
                                                                   0.00
               N3
                   GUA
 ATOM
         702
                           73
                                  -11.967 -19.953
                                                     8.329
                                                            1.00
                                                                   0.00
 ATOM
         703
               C4
                   GUA
                          73
                                  -11.571 -19.811
                                                     7.037
                                                            1.00
                                                                   0.00
 ATOM
          704 C3' GUA
                           73
                                  -15.469 -17.448
                                                     5.347 1.00 0.00
```

```
189
                                                                    190
        705 C2' GUA
ATOM
                         73
                                 -13.955 -17.444
                                                    5.588
                                                           1.00 0.00
ATOM
        706
             03'
                 GUA
                         73
                                 -16.238 -17.151
                                                    6.498
                                                           1.00
                                                                 0.00
             P
        707
                  GUA
                         74
ATOM
                                 -16.233 -15.705
                                                    7.209
                                                           1.00
                                                                 0.00
        708
             OP1 GUA
                         74
                                 -15.409 -14.770
ATOM
                                                    6.410 1.00
                                                                 0.00
             OP2 GUA
        709
                         74
                                 -17.626 -15.349
                                                    7.557
                                                          1.00
ATOM
                                                                 0.00
             05'
                  GUA
                                                                 0.00
ATOM
        710
                         74
                                 -15.441 -16.052
                                                    8.564
                                                           1.00
             C5'
                  GUA
                         74
                                 -15.993 -16.947
                                                    9.512 1.00
ATOM
        711
                                                                 0.00
        712 C4'
                  GUA
                         74
                                                   10.703 1.00
ATOM
                                 -15.049 -17.109
                                                                 0.00
        713
             04'
                  GUA
                                                   10.265
ATOM
                         74
                                 -13.811 -17.642
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        714
             C1'
                  GUA
                         74
                                 -12.743 -16.936
                                                   10.858
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  GUA
ATOM
             N9
                                 -11.573 -17.008
                                                    9.954
        715
                         74
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        716
             68
                  GUA
                         74
                                                    8.631
                                                           1.00
                                 -11.513 -16.646
                                                                 0.00
                  GUA
ATOM
             N7
                         74
                                 -10.388 -16.938
                                                    8.042
                                                          1.00
                                                                 0.00
        717
ATOM
        718
             C5
                  GUA
                         74
                                  -9.644 -17.541
                                                    9.047
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  GUA
ATOM
        719
             ¢6
                         74
                                  -8.348 -18.128
                                                    8.989
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  GUA
ATOM
        720
             06
                         74
                                  -7.627 -18.251
                                                    8.003
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  GUA
ATOM
        721
             N1
                         74
                                  -7.928 -18.626
                                                   10.216
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  GUA
ATOM
        722
             C2
                         74
                                  -8.690 -18.602
                                                   11.365
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        723
             N2
                  GUA
                         74
                                  -8.133 -19.082
                                                   12.479
                                                           1.00
                                                                  0.00
              N3
                  GUA
                                  -9.924 -18.079
                                                  11.418
                                                           1.00
ATOM
        724
                         74
                                                                  0.00
ATOM
        725
              C4
                  GUA
                         74
                                 -10.347 -17.571
                                                  10.229
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        726
              C3'
                  GUA
                                 -14.740 -15.770
                                                   11.386
                                                           1.00
                                                                  0.00
                         74
              C2'
ATOM
        727
                  GUA
                         74
                                 -13.295 -15.517
                                                   10.957
                                                           1.00
                                                                  0.00
              03'
                  GUA
                                                  12.781
ATOM
        728
                         74
                                 -14.914 -15.932
                                                           1.00
                                                                  0.00
        729
             P
                  THY
ATOM
                         75
                                 -14.690 -14.727
                                                   13.827
                                                           1.00
                                                                  0.00
              OP1 THY
                                 -14.701 -13.441
                                                   13.097
ATOM
        730
                         75
                                                           1.00
                                                                  0.00
              OP2 THY
                                                   14.978
ATOM
        731
                         75
                                 -15.595 -14.934
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        732
              05'
                  THY
                         75
                                 -13.187 -15.032
                                                   14.301
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C5'
ATOM
        733
                  THY
                         75
                                 -12.888 -16.192
                                                   15.050
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         734
              C4'
                  THY
                         75
                                 -11.389 -16.255
                                                   15.325
                                                           1.00
                                                                  0.00
              04'
                  THY
ATOM
         735
                         75
                                 -10.666 -16.333
                                                   14.111
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C1'
                  THY
                                                   14.289
ATOM
         736
                          75
                                  -9.424 -15.687
                                                            1.00
                                                                  0.00
        737
              N1
                  THY
                                                   12.964
ATOM
                          75
                                  -8.813 -15.389
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C6
                  THY
                          75
                                  -9.547 - 14.744
                                                   11.994
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         738
ATOM
         739
              C5
                  THY
                          75
                                  -9.046 -14.550
                                                   10.748
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  THY
ATOM
         740
              C7
                          75
                                  -9.935 -13.796
                                                    9.776
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C4
                  THY
                                                   10.374
ATOM
         741
                          75
                                  -7.735 -15.034
                                                           1.00
                                                                  0.00
              04
                  THY
                          75
                                                                  0.00
ATOM
         742
                                  -7.221 -14.940
                                                    9.263
                                                           1.00
ATOM
         743
              N3
                  THY
                          75
                                  -7.053 -15.659
                                                   11.402
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C2
                  THY
ATOM
         744
                          75
                                  -7.526 -15.859
                                                   12.691
                                                           1.00
                                                                  0.00
              02
                  THY
                                                   13.518
ATOM
         745
                          75
                                  -6.820 -16.429
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         746
              C3'
                  THY
                          75
                                 -10.874 -14.999
                                                   16.048
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         747
              C2' THY
                          75
                                  -9.851 -14.436
                                                   15.053
                                                           1.00
                                                                  0.00
              03'
                  THY
ATOM
         748
                          75
                                 -10.323 -15.399
                                                   17.290
                                                           1.00
                                                                  0.00
              P
                  THY
                                                   18.367
ATOM
         749
                          76
                                  -9.759 - 14.340
                                                            1.00
                                                                  0.00
              OP1 THY
ATOM
         750
                          76
                                  -9.801 -14.967
                                                   19.706
                                                           1.00
                                                                  0.00
              OP2 THY
                          76
                                 -10.408 -13.030
                                                   18.142
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         751
              05'
                  THY
                                  -8.225 -14.230
                                                   17.913
                                                                  0.00
ATOM
         752
                          76
                                                            1.00
ATOM
         753
              C5'
                  THY
                          76
                                  -7.354 -15.333
                                                   18.046
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         754 C4' THY
                                  -6.024 -15.024 17.366
                          76
                                                          1.00
                                                                 0.00
```

					(97)				特開20
	191								192
ATOM	755	04'	THY	76	-6.205	-14.834	15.975	1.00	0.00
ATOM	756	C1'	THY	76	-5.247	-13.895	15.549	1.00	0.00
ATOM	757	N1	THY	76	-5.539	-13.414	14.170	1.00	0.00
ATOM	758	C6	THY	76	-6.685	-12.705	13.895	1.00	0.00
ATOM	759	C5	THY	76	-6.948	-12.248	12.644	1.00	0.00
ATOM	760	С7	THY	76	-8.232		12.493	1.00	0.00
ATOM	761	C4	THY	76	-6.049		11.537	1.00	0.00
ATOM	762	04	THY	76		-12.158	10.369	1.00	0.00
ATOM	763	N3	THY	76	-4.938		11.889	1.00	0.00
ATOM	764	C2	THY	76		-13.734	13.149	1.00	0.00
ATOM	765	02	THY	76		-14.415	13.316	1.00	0.00
ATOM	766	C3'	THY	76		-13.731	17.885	1.00	0.00
ATOM	767	C2'	THY	76		-12.838	16.642	1.00	0.00
ATOM	768	03'	THY	76		-14.051	18.262	1.00	0.00
ATOM	769	P	ADE	77		-13.116	19.227	1.00	0.00
ATOM	770		ADE	77		-13.593	20.619	1.00	0.00
ATOM	771		ADE	77		-11.696	18.890	1.00	0.00
ATOM	772	05'	ADE	77		-13.524	18.689	1.00	0.00
ATOM	773	C5'	ADE	77		-14.858	18.784	1.00	0.00
ATOM	774	C4'	ADE	77		-15.182	17.598	1.00	0.00
ATOM	775	04'	ADE	77		-14.812	16.379	1.00	0.00
ATOM	776	C1'	ADE	77		-13.952	15.634	1.00	0.00
ATOM	777	N9	ADE	77		-13.011	14.843	1.00	0.00
ATOM	778	C8	ADE	77		-12.218	15.284	1.00	0.00
ATOM	779	N7	ADE	77		-11.526	14.346	1.00	0.00
ATOM	780	C5	ADE	77		-11.867	13.203	1.00	0.00
ATOM	781	C6	ADE	77		-11.471	11.858	1.00	0.00
ATOM	782	N6	ADE	77		-10.614	11.456	1.00	0.00
ATOM	783	N1	ADE	77		-11.947	10.965	1.00	0.00
ATOM	784	C2	ADE	77		-12.805	11.385	1.00	0.00
ATOM	785	N3	ADE	77		-13.329	12.601	1.00	0.00
ATOM	786	C4	ADE	77		-12.775	13.490	1.00	0.00
ATOM	787		ADE	77		-14.431			
ATOM	788	C2'	ADE	77		-13.249	16.699	1.00	
ATOM	789	03'	ADE	77		-15.339	17.086	1.00	0.00
ATOM	790	P	GUA	78		-15.117	17.192	1.00	0.00
ATOM	791		GUA	78		-14.462	18.481	1.00	0.00
ATOM	792		GUA	78		-16.408	16.853	1.00	0.00
ATOM	793	05'	GUA	78		-14.086	16.006	1.00	0.00
ATOM	794	C5'	GUA	78		-14.539	14.681	1.00	0.00
ATOM	795	C4'	GUA	78		-13.359	13.728	1.00	0.00
ATOM	796	04'	GUA	78		-12.641	13.627	1.00	0.00
ATOM	797	C1'	GUA			-11.410	13.036	1.00	0.00
ATOM	798	N9	GUA			-10.490	13.106	1.00	0.00
ATOM	799	C8	GUA			-10.152	14.196	1.00	
ATOM	800	N7	GUA			-9.417	13.914	1.00	0.00
ATOM	801	C5	GUA		0.342	-9.245	12.535	1.00	
ATOM	802	C6	GUA		-0.526	-8.549	11.637	1.00	
ATOM	803	06	GUA		-1.549	-7.922	11.896	1.00	
ATOM	804	N1	GUA		-0.104	-8.637	10.316	1.00	
			•	-		•			

193 194 1.00 0.00 C2GUA 78 1.024 - 9.3119.901 ATOM 805 GUA -9.233 0.00 ATOM 806 N278 1.346 8.610 1.00 GUA -9.9720.00 N3 78 10.736 1.00 ATOM 807 1.836 ATOM 808 C4 **GUA** 78 1.441 -9.901 12.034 1.00 0.00 C3, GUA 78 5.126 -12.317 1.00 0.00 ATOM 809 14.158 C2' GUA 4.400 -10.985 13.904 1.00 0.00 ATOM 810 78 03' GUA 13.368 1.00 0.00 78 6.270 - 12.559ATOM 811 P GUA 7.625 -11.721 13.514 1.00 0.00 ATOM 812 79 OP1 GUA 0.00 813 79 8.722 -12.616 13.077 1.00 ATOM OP2 GUA 7.674 -11.162 14.884 1.00 0.00 ATOM 79 814 GUA 0.00 ATOM 815 05' 79 7.396 - 10.55212.433 1.00 C5' GUA 79 7.229 - 10.86811.060 1.00 0.00 ATOM 816 GUA 10.290 0.00 ATOM 817 C4' 79 6.597 -9.7081.00 GUA -9.338 10.829 1.00 0.00 ATOM 04' 5.340 818 79 1.00 0.00 C1' GUA 5.092 -8.009 10.430 ATOM 819 79 -7.41011.221 1.00 ATOM 820 N9 GUA 3.992 0.00 79 GUA -7.429 12.582 1.00 0.00 **ATOM** 821 68 79 3.828 N7 GUA 2.735 -6.85612.999 1.00 0.00 ATOM 822 79 ATOM 823 C5 GUA 79 2.125 -6.41511.830 1.00 0.00 824 C6 GUA 79 0.884 -5.73711.644 1.00 0.00 ATOM **ATOM** 06 GUA 79 0.078 -5.37512.498 1.00 0.00 825 N1 GUA 0.600-5.50510.304 1.00 0.00 ATOM 826 79 -5.8659.258 1.00 0.00 ATOM C2 GUA 79 1.421 827 -5.5661.00 ~ ATOM 828 N2 GUA 79 1.006 8.025 0.00 -6.4879.429 1.00 0.00 N3 GUA 79 2.598 ATOM 829 -6.74410.735 1.00 0.00 ATOM 830 C4GUA 79 2.890 ATOM 831 C3' GUA 79 7.442 -8.42610.287 1.00 0.00 C2' 6.435 -7.37110.765 1.00 0.00 **ATOM** 832 GUA 79 03' GUA 7.920 -8.225 1.00 0.00 ATOM 833 79 8.967 GUA 8.821 -6.9558.543 1.00 0.00 ATOM 834 P 80 OP1 GUA 80 9.646 -7.3427.377 1.00 0.00 ATOM 835 **ATOM** 836 OP2 GUA 80 9.466 -6.3969.752 1.00 0.00 05' GUA -5.9178.037 ATOM 837 80 7.697 1.00 0.00 C5' GUA -6.1991.00 0.00 ATOM 838 80 6.919 6.889 **GUA** 5.861 -5.113 6.680 1.00 0.00 ATOM 839 C4' 80 04' GUA 80 5.005 -5.0517.807 1.00 0.00 **ATOM** 840 C1' GUA -3.7038.040 1.00 0.00 ATOM 80 4.668 841 -3.5159.413 1.00 ATOM 842 N9 GUA 80 4.158 0.00 -3.84510.601 1.00 0.00 **ATOM** 843 С8 GUA 80 4.758 **ATOM** 844 N7 GUA 80 4.030 -3.602 11.653 1.00 0.00C5 GUA 80 2.855 -3.07211.130 1.00 0.00 ATOM 845 -2.653**ATOM** 846 63 GUA 80 1.660 11.790 1.00 0.00 1.00 ATOM 847 06 GUA 80 1.409 -2.66012.993 0.00 0.686 -2.227 10.896 1.00 0.00 ATOM 848 N1 GUA 80 C2GUA 0.833 -2.2009.527 1.00 0.00 ATOM 849 80 850 N2 **GUA** 80 -0.205-1.7748.803 1.00 0.00 ATOM -2.584ATOM 851 N3GUA 80 1.957 8.903 1.00 0.00 2.925 -3.0151.00 0.00 ATOM 852 C4 GUA 80 9.758 C3' GUA 80 6.465 -3.7076.533 1.00 0.00 ATOM 853 854 C2' GUA 6.012 - 3.0147.814 1.00 0.00 ATOM 80

ATOM 880 N1 CYT 82 -3.625 -3.6378.334 1.00 0.00 63 CYT ATOM 881 82 -4.556-3.5879.336 1.00 0.00 ATOM 882 C5 CYT 82 -4.321-4.09610.560 1.00 0.00 883 C4CYT -3.042 -4.7081.00 ATOM 82 10.770 0.00 **ATOM** 884 N4 CYT 82 -2.765-5.27811.942 1.00 0.00 ATOM 885 N3 CYT 82 -2.129-4.7659.787 1.00 0.00 C2 CYT -2.387-4.246ATOM 886 82 8.551 1.00 0.00 02 CYT 82 -1.544-4.334ATOM 887 7.660 1.00 0.00 C3' ATOM 888 CYT -5.831-2.5571.00 82 5.610 0.00 C2' CYT -5.172 -3.679 ATOM 889 82 6.407 1.00 0.00 03' -2.522 ATOM 890 CYT -5.43182 4.248 1.00 0.00 ATOM 891 P CYT 83 -5.848-3.667 1.00 0.00 3.186 **ATOM** 892 OP1 CYT -5.922 -3.04783 1.845 1.00 0.00 ATOM 893 OP2 CYT 83 -7.011-4.4093.722 1.00 0.00 05' CYT -4.652 ATOM 894 83 -4.573 3.215 1.00 0.00 ATOM 895 C5' CYT 83 -3.335-4.2662.645 1.00 0.00 ATOM 896 C4' CYT 83 -2.266-5.3192.951 1.00 0.00 04' CYT ATOM 897 83 -2.192-5.5064.348 1.00 0.00 C1' CYT -6.836ATOM 898 83 -1.8224.627 1.00 0.00 **ATOM** 899 N1 CYT 83 -2.324-7.1785.982 1.00 0.00 63 CYT 83 -3.633 -6.926 ATOM 900 6.295 1.00 0.00 7.540 ATOM 901 C5 CYT 83 -4.115 -7.101 1.00 0.00 ATOM 902 C4 CYT 83 -3.192 - 7.5728.533 1.00 0.00 N4 ATOM 903 CYT 83 -3.593 -7.7339.796 1.00 0.00 N3 CYT ATOM 904 83 -1.915 -7.8438.221 1.00 0.00

					(100)				特開20
	197								198
ATOM	905	C2	CYT	83	-1.450	-7.668	6.949	1.00	0.00
ATOM	906	02	CYT	83	-0.288	-7.953	6.672	1.00	0.00
ATOM	907	C3'	CYT	83	-2.570	-6.700	2.344	1.00	0.00
ATOM	908	C2'	CYT	83	-2.560	-7.633	3.554	1.00	0.00
ATOM	909	03'	CYT	83	-1.579	-7.004	1.373	1.00	0.00
ATOM	910	P	THY	84	-1.543	-8.403	0.558	1.00	0.00
ATOM	911	0P1		84	-0.769	-8.198	-0.686	1.00	0.00
ATOM	912	0P2		84	-2.917	-8.951	0.491	1.00	0.00
ATOM	913	05'	THY	84	-0.672	-9.343	1.534	1.00	0.00
ATOM	914	C5'	THY	84	0.675	-9.034	1.835	1.00	0.00
ATOM	915	C4'	THY	84	1.206	-9.974	2.920	1.00	0.00
ATOM	916	04'	THY	84	0.429	-9.862	4.098	1.00	0.00
ATOM	917	C1'	THY	84		-11.102	4.770	1.00	0.00
ATOM	918	N1	THY	84		-11.163	5.797	1.00	0.00
ATOM	919	C6	THY	84		-10.845	5.454	1.00	0.00
ATOM	920	C5	THY	84		-10.759	6.392	1.00	0.00
ATOM	921	C7	THY	84		-10.427	5.884	1.00	0.00
ATOM	922	C4	THY	84		-10.981	7.795	1.00	0.00
ATOM	923	04	THY	84		-10.860	8.705	1.00	0.00
ATOM	924	N3	THY	84		-11.362	8.061	1.00	0.00
ATOM	925	C2	THY	84		-11.469	7.122	1.00	0.00
ATOM	926	02	THY	84		-11.820	7.472	1.00	0.00
ATOM	927	C3'	THY	84		-11.458	2.519	1.00	0.00
ATOM	928	C2'	THY	84		-12.055	3.596	1.00	0.00
ATOM	929	03'	THY	84		-11.969	2.519	1.00	0.00
ATOM	930	P	ADE	85		-13.486	2.099	1.00	0.00
ATOM	931		ADE	85		-13.957	1.090	1.00	0.00
ATOM	932		ADE	85		-13.556	1.779	1.00	0.00
ATOM	933	05'	ADE	85		-14.280	3.471	1.00	0.00
ATOM	934	C5'	ADE	85		-13.995	4.618	1.00	0.00
ATOM	935	C4'	ADE	85		-14.682	5.843	1.00	0.00
ATOM	936	04'	ADE	85		-14.002	6.106	1.00	0.00
ATOM	937	C1'	ADE	85		-15.227	6.873		
		N9	ADE	85		-14.959	6.894	1.00	
ATOM ATOM	938 939	C8	ADE	85		-14.615	5.840	1.00	
ATOM	940	N7	ADE	85		-14.234	6.179	1.00	0.00
ATOM	941	C5	ADE	85		-14.359	7.564	1.00	0.00
ATOM	942	C6	ADE	85		-14.073	8.554	1.00	
ATOM	942	N6	ADE	85		-13.554	8.275	1.00	
		NO N1	ADE	85			9.836	1.00	
ATOM	944	C2				-14.329 -14.838		1.00	
ATOM	945		ADE	85 95		-15.114	10.124	1.00	
ATOM	946 947	N3 C4	ADE ADE	85 85		-14.842	9.298 8.008	1.00	
ATOM									
ATOM ATOM	948 949	C3'	ADE ADE	85 85		-16.198 -16.470	5.679 6.071	1.00	
ATOM		03'						1.00	
ATOM	950			85 86		-16.797 -18.380	6.539		
ATOM	951	P OD1	ADE	86 86		-18.380 -18.625	6.566	1.00	
ATOM	952		ADE	86 86		-18.625 -18.063	6.839		
ATOM	953		ADE	86 86		-18.963	5.364	1.00	
ATOM	954	UO	ADE	86	2.908	-18.836	7.841	1.00	0.00

					(101)			特開2(
	199							200
ATOM	955	C5'	ADE	86	3.411 -18.544	9.148	1.00	0.00
ATOM	956	C4'	ADE	86	2.354 -19.017	10.137	1.00	0.00
ATOM	957	04'	ADE	86	1.136 -18.332	9.912	1.00	0.00
ATOM	958	C1'	ADE	86	0.059 -19.193	10.197	1.00	0.00
ATOM	959	N9	ADE	86	-1.145 -18.701	9.488	1.00	0.00
ATOM	960	С8	ADE	86	-1.325 -18.549	8.134	1.00	0.00
ATOM	961	N7	ADE	86	-2.474 -18.038	7.795	1.00	0.00
ATOM	962	C5	ADE	86	-3.098 -17.814	9.015	1.00	0.00
ATOM	963	C6	ADE	86	-4.341 -17.250	9.357	1.00	0.00
ATOM	964	N6	ADE	86	-5.195 -16.809	8.432	1.00	0.00
ATOM	965	N1	ADE	86	-4.651 -17.106	10.658	1.00	0.00
ATOM	966	C2	ADE	86	-3.775 -17.514	11.573	1.00	0.00
ATOM	967	N3	ADE	86	-2.579 -18.067	11.385	1.00	0.00
ATOM	968	C4	ADE	86	-2.290 -18.191	10.058	1.00	0.00
ATOM	969	C3'	ADE	86	2.059 -20.517	9.992	1.00	0.00
ATOM	970	C2'	ADE	86	0.563 -20.532	9.655	1.00	0.00
ATOM	971	03'	ADE	86	2.445 -21.148	11.199	1.00	0.00
ATOM	972	P	CYT	87 ·	2.237 -22.721	11.476	1.00	0.00
ATOM	973		CYT	87	3.137 -23.107	12.585	1.00	0.00
ATOM	974		CYT	87	2.299 -23.450	10.186	1.00	0.00
ATOM	975	05'	CYT	87	0.743 -22.706	12.064	1.00	0.00
ATOM	976	C5'	CYT	87	0.516 -22.002	13.269	1.00	0.00
ATOM	977	C4'	CYT	87	-0.954 -21.704	13.534	1.00	0.00
ATOM	978	04'	CYT	87 -	-1.602 -21.120	12.429	1.00	0.00
ATOM	979	C1'	CYT	87	-2.984 -21.347	12.592	1.00	0.00
ATOM	980	N1	CYT	87	-3.696 -21.138	11.306	1.00	0.00
ATOM	981	C6	CYT	87	-3.111 -21.530	10.129	1.00	0.00
ATOM	982	C5	CYT	87	-3.680 -21.264	8.933	1.00	0.00
ATOM	983	C4	CYT	87	-4.936 -20.570	8.949	1.00	0.00
ATOM	984	N4	CYT	87	-5.569 -20.272	7.815	1.00	0.00
ATOM	985	N3	CYT	87	-5.515 -20.210	10.102	1.00	0.00
ATOM	986	C2	CYT	87	-4.931 -20.488	11.301	1.00	0.00
ATOM	987		CYT	87	-5.496 -20.167			
ATOM	988	C3'		87	-1.754 -22.956	13.879	1.00	0.00
ATOM	989	C2'	CYT	87	-3.001 -22.811	13.008	1.00	0.00
ATOM	990	03'	CYT	87	-2.014 -22.887	15.268	1.00	0.00
ATOM	991	P	CYT	88	-2.630 -24.107	16.107	1.00	0.00
ATOM	992		CYT	88	-2.255 -23.844	17.516	1.00	0.00
ATOM	993		CYT	88	-2.219 -25.371	15.463	1.00	0.00
ATOM	994	05'		88	-4.221 -23.913	15.928	1.00	0.00
ATOM	995	C5'	CYT	88	-4.915 -22.862	16.579	1.00	0.00
ATOM	996	C4'	CYT	88	-6.324 -22.684	16.002	1.00	0.00
ATOM	997	04'	CYT	88	-6.262 -22.366	14.628	1.00	0.00
ATOM	998	C1'	CYT	88	-7.502 -22.697	14.040	1.00	0.00
ATOM	999	N1	CYT	88	-7.335 -22.859	12.576	1.00	0.00
ATOM	1000	C6	CYT	88	-6.248 -23.539	12.097	1.00	0.00
ATOM	1000	C5	CYT	88	-6.008 -23.664	10.778	1.00	0.00
ATOM	1002	C4	CYT	88	-6.971 -23.078	9.891	1.00	0.00
ATOM	1003	N4	CYT	88	-6.824 -23.166	8.570	1.00	0.00
ATOM	1004	N3	CYT	88	-8.063 -22.457	10.360	1.00	0.00
	- 301		- * *	30	2.222 55.101			

-15.750 -25.535

-16.605 -24.148

-17.046 -22.958

-17.286 -23.194

-16.110 -23.711

-16.458 -24.594

-15.311 -25.505

-14.779 -26.222

-13.660 -26.966

-13.183 -27.743

-12.959 -27.015

-11.910 -27.621

-13.565 - 26.290

-14.741 - 25.562

-15.239 -25.028

-18.402 - 24.209

-17.661 -25.330

-19.388 -23.578

-20.770 -24.307

-21.112 -25.300

-21.749 -23.261

-20.359 -25.103

-20.129 -24.423

-19.528 -25.372

16.358

14.456

13.827

12.331

11.740

10.699

10.451

11.494

11.340

12.552

10.078

9.882

9.060

9.178

8.192

12.024

11.290

11.223

10.805

11.847

10.438

9.468

8.251

1.00

1.00

1.00

1.00

1.00

1.00

1.00

1.00

1.00

1.00

1.00

1.00

1.00

1.00

1.00

1.00

1.00

1.00

1.00

1.00

1.00

1.00

1.00

7.209 1.00 0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

ATOM

ATOM

ATOM ATOM

ATOM

**ATOM** 

**ATOM** 

ATOM

ATOM ATOM

ATOM

**ATOM** 

ATOM

ATOM

ATOM

1031

1032

1033

1034

1035

1036

1037 N1 THY

1038

1039

1040

1041

1042 04 THY

1043

1044

1045

1046

1047

1048

1049 P

1050

1051

1052

1053

OP2 THY

05' THY

C5' THY

C4' THY

04' THY

C1' THY

C6 THY

C5

C7 THY

C4 THY

N3 THY

C2 THY

02 THY

C3' THY

C2'

03' THY

05' ADE

C5'

1054 C4' ADE

THY

ADE

ADE

OP1 ADE

OP2 ADE

THY

90

90

90

90

90

90

90

90

90

90

90

90

90

90

90

90

90

90

91

91

91

91

91

91

```
203
ATOM
       1055
             04'
                 ADE
                         91
                                -18.271 -25.864
                                                    7.619 1.00 0.00
ATOM
       1056
             C1'
                 ADE
                         91
                                -17.992 - 26.985
                                                    6.813 1.00
                  ADE
ATOM
       1057
             N9
                         91
                                -16.903 -27.775
                                                    7.416
                                                          1.00
ATOM
       1058
             68
                  ADE
                         91
                                -16.770 -28.150
                                                    8.727
                                                           1.00
ATOM
       1059
             N7
                  ADE
                                -15.645 -28.756
                                                           1.00
                         91
                                                    8.999
ATOM
       1060
             C5
                  ADE
                         91
                                -15.002 -28.810
                                                    7.764
                                                           1.00
                  ADE
ATOM
       1061
             60
                                 -13.752 - 29.313
                                                    7.347
                                                           1.00
                         91
ATOM
       1062
             N6
                  ADE
                         91
                                -12.866 - 29.847
                                                    8.189
                                                           1.00
ATOM
                  ADE
                                -13.442 -29.262
                                                           1.00
       1063
             N1
                         91
                                                    6.038
ATOM
       1064
             C2
                  ADE
                         91
                                 -14.313 -28.727
                                                    5.187
                                                           1.00
              N3
                  ADE
ATOM
       1065
                                 -15.492 -28.178
                                                    5.456
                                                           1.00
                         91 · ·
                  ADE
ATOM
       1066
             C4
                         91
                                 -15.782 -28.252
                                                    6.783
                                                           1.00
ATOM
       1067
              C3'
                  ADE
                         91
                                 -20.365 -26.630
                                                    6.935
                                                           1.00
             C2'
                  ADE
ATOM
       1068
                         91
                              -19.310 -27.742
                                                    6.867
                                                           1.00
              03'
                  ADE
ATOM
        1069
                         91
                                 -21.088 -26.421
                                                    5.732
                                                           1.00
        1070
             P
                  ADE
ATOM
                         92
                                 -21.998 -27.555
                                                    5.030
                                                           1.00
ATOM
        1071
              OP1 ADE
                                 -22.987 -26.880
                                                           1.00
                          92
                                                    4.161
                                                    6.065
ATOM
        1072
              OP2 ADE
                         92
                                 -22.453 -28.508
                                                           1.00
              05' ADE
ATOM
        1073
                         92:--
                                 -20.933 -28.307
                                                    4.080
                                                           1.00
        1074
             C5'
                  ADE
                                 -20.270 -27.613
ATOM
                          92
                                                    3.039
                                                           1.00
                                                                  0.00
        1075
             C4'
                 ADE
                                 -19.202 -28.500
                                                    2.390
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
                          92
ATOM
        1076
              04'
                  ADE
                          92
                                 -18.238 - 28.894
                                                    3.352
                                                          1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1077
              C1'
                  ADE
                          92
                                 -17.862 -30.232
                                                    3.108
                                                           1.00
                                                                  0.00
        1078
              N9
                  ADE
ATOM
                          92
                                 -17.272 -30.821
                                                    4.332
                                                           1.00
                                                                  0.00
              С8
                  ADE
                                 -17.824 - 30.887
ATOM
        1079
                          92
                                                    5.586
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1080
              N7
                  ADE
                          92
                                 -17.039 -31.385
                                                    6.500
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1081
              C5
                  ADE
                          92
                                 -15.878 -31.680
                                                    5.797
                                                           1.00
                                                                  0.00
        1082
              63
                  ADE
                                 -14.641 -32.229
ATOM
                          92
                                                    6.188
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1083
              N6
                  ADE
                          92
                                 -14.380 -32.552
                                                    7.456
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  ADE.
                                 -13.686 -32.405
ATOM
        1084
              N1
                                                    5.256
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          92
ATOM
        1085
              C2
                  ADE
                          92
                                 -13.950 -32.054
                                                    3.999
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1086
              N3
                  ADE
                          92
                                 -15.066 -31.524
                                                    3.505
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  ADE
ATOM
        1087
              C4
                          92
                                 -16.009 -31.354
                                                    4.470
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C3'
                 ADE
                                 -19.775 -29.799
ATOM
        1088
                          92
                                                    1.799
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1089
              C2'
                  ADE
                          92
                                 -19.211 -30.853
                                                    2.756
                                                            1.00
                                                                  0.00
              03'
                  ADE
ATOM
        1090
                          92
                                 -19.296 - 29.933
                                                    0.472
                                                           1.00
                                                                  0.00
        1091
              P
                  CYT
                                 -19.779 -31.116
ATOM
                          93
                                                   -0.513
                                                            1.00
                                                                  0.00
        1092
              OP1 CYT
                          93
                                 -20.875 -31.869
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
                                                    0.137
        1093
              OP2 CYT
                                 -19.973 -30.549
ATOM
                          93
                                                   -1.866
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1094
              05' CYT
                          93
                                 -18.480 -32.064
                                                   -0.544
                                                           1.00
                                                                  0.00
        1095
              C5' CYT
                                 -17.316 -31.685
                                                   -1.256
ATOM
                          93
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1096
              C4' CYT
                          93
                                 -16.212 -32.715
                                                   -1.005
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1097
              04' CYT
                          93
                                 -15.985 -32.808
                                                    0.382
                                                           1.00
                                                                  0.00
        1098
              C1' CYT
                                 -15.514 -34.098
                                                                  0.00
ATOM
                          93
                                                    0.692 1.00
ATOM
        1099
              N1
                  CYT
                          93
                                 -15.823 -34.390
                                                                  0.00
                                                    2.114
                                                            1.00
ATOM
        1100
              63
                  CYT
                          93
                                 -17.050 -34.060
                                                    2.632
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C5
                 CYT
                                 -17.352 -34.267
                                                                  0.00
ATOM
        1101
                          93
                                                    3.932 1.00
ATOM
        1102
              C4
                  CYT
                          93
                                 -16.320 -34.836
                                                                  0.00
                                                    4.751
                                                            1.00
ATOM
        1103
              N4
                  CYT
                          93
                                 -16.491 -34.969
                                                    6.067
                                                            1.00
                                                                  0.00
        1104 N3
                 CYT
                                 -15.134 -35.183
ATOM
                          93
                                                    4.234 1.00
                                                                  0.00
```

					(104)					3-135087
, more	205	00	ou.m	00	44.055	04.000	0.04		206	
ATOM	1105		CYT	93	-14.855			3 1.00		
ATOM	1106		CYT	93	-13.765					
ATOM	1107	C3'		93	-16.600				0.00	
ATOM ATOM	1108 1109	C2'		93	-16.323					
END	1109	U3	CII	93	-15.813	-34.333	-2.343	3 1.00	0.00	
HEADER	በበበበ	በበ								
HEADER	0000	00								
REMARK		0.00	)528	1.66279	0.025	16 0.0	1714	2.13930	1.68741	
0.000	00									
REMARK		2.25	5263	0.39320	0.4105	50 0.8	4501 (	0.60392		
DEHADY		0.00	20.41	0.01000	0.004	10 00	1001 (	0.0700		
REMARK		0.00	J941	0.01220	0.004	19 0.0	1361 (	0.00700		
REMARK			118	117		0	1	0	0	
	0									
REMARK			1378	305	4(	60	273	340		
REMARK		0.0	3215	0.20317	0.032	11 0.0	3226	0.20317	0.09450	
K Dill Wat	•	0.0	3210	0.00011	01002	0.0	0220	0120011	0.00100	
REMARK		1.9	2929	0.15700						
REMARK			1	1		0	0	0	0	
KEMAKK	0		1	1		U	U	U	U	
ATOM		N	GLU	1	-4.626	-26.690	35.26	0 1.00	0.00	
ATOM	. 2	CA	GLU	. 1	-4.260	-26.578	33.83	6 1.00	0.00	
ATOM	3	CB	GLU	1	-5.456	-26.988	32.95	7 1.00	0.00	
ATOM	4	CG	GLU	1	-5.122	-27.198	31.46	9 1.00	0.00	
ATOM	5		GLU	1	-4.937	-25.901	30.68	8 1.00	0.00	
ATOM	6		GLU	1		-25.881				
ATOM		0E2		1		-24.930				
ATOM			GLU .	. 1		-25.154				
ATOM	9	0	GLU	1		-24.228			0.00	
ATOM	10		LYS	2		-24.985				
ATOM. Atom	11 12		LYS LYS	2 2		-23.702 -23.278				
ATOM	13		LYS	2		-21.936				
ATOM	14	CD	LYS	2		-20.755				
ATOM	15		LYS	2		-20.547				
ATOM	16	NZ	LYS	2	-1.666	-20.327	35.07	9 1.00	0.00	
ATOM	17	C	LYS	2	-1.883	-23.842	30.70	4 1.00	0.00	
ATOM	18	0	LYS	2	-0.982	-24.634	30.43	4 1.00	0.00	
ATOM	19		HIS	3		-23.079				
ATOM	20		HIS	3		-23.118				
ATOM	21	CB	HIS	3		-22.233				
ATOM	22		HIS	3		-22.637				
ATOM Atom	23 24		HIS HIS	3 3		-23.769 -23.810				
ATOM	25		HIS	3		-22.786				
ATOM		CD2		3		-22.050			0.00	•
				-	2.000			0		

	207								208
ATOM	27	C	HIS	3	-0.669	-22.654	28.175	1.00	0.00
ATOM	28	0	HIS	3	-0.164	-21.830	28.937	1.00	0.00
ATOM	29	N	ARG	4	-0.016	-23.190	27.138	1.00	0.00
ATOM	30	CA	ARG	4	1.353	-22.878	26.747	1.00	0.00
ATOM	31	CB	ARG	4		-24.167	26.674	1.00	0.00
ATOM	32	CG	ARG	4		-24.535	27.982	1.00	0.00
ATOM	33	CD	ARG	4		-24.918	29.131	1.00	0.00
ATOM	34	NE	ARG	4		-25.500	30.240	1.00	0.00
ATOM	35	CZ	ARG	4		-26.204	31.268	1.00	0.00
ATOM	36		ARG	4		-26.332	31.428	1.00	0.00
ATOM	37		ARG	4		-26.785	32.141	1.00	0.00
ATOM	38	С	ARG	4		-22.198	25.376	1.00	0.00
ATOM	39	0	ARG	4		-22.343	24.617	1.00	0.00
ATOM	40	N	ALA	5		-21.461	25.053	1.00	0.00
ATOM	41	CA	ALA	5		-20.780	23.774	1.00	0.00
ATOM	42	СВ	ALA	5		-19.779	23.835	1.00	0.00
ATOM	43	C	ALA	5		-21.814	22.667	1.00	0.00
ATOM	44	0	ALA	5		-22.826	22.885	1.00	0.00
ATOM	45	N	ARG			-21.555	21.483	1.00	0.00
ATOM	46	CA	ARG	6		-22.434	20.321	1.00	0.00
ATOM	47	CB	ARG	6		-22.227	19.450	1.00	0.00
ATOM	48	CG	ARG	6		-22.873	20.100	1.00	0.00
ATOM	49	CD	ARG	6		-21.970	20.006	1.00	0.00
ATOM	50	NE	ARG	6		-20.883	20.996	1.00	0.00
ATOM	51	CZ	ARG	6		-19.571	20.776	1.00	0.00
ATOM	52		ARG	6		-18.705	21.785	1.00	0.00
ATOM	53		ARG	6		-19.089	19.570	1.00	0.00
ATOM	54	С	ARG	6		-22.229	19.517	1.00	0.00
ATOM	55	0	ARG	6		-23.149	18.818	1.00	0.00
ATOM	56	N	LYS:			-21.046	19.612	1.00	0.00
ATOM	57	CA	LYS	7		-20.679	18.912	1.00	0.00
ATOM	58	СВ	LYS	7 .		-21.608	19.231	1.00	0.00
ATOM	59	CG	LYS	7		-21.539	20.665	1.00	0.00
ATOM	60	CD	LYS	7		-22.111	21.701	1.00	0.00
ATOM	61	CE	LYS	. 7		-22.422	23.043	1.00	0.00
ATOM	62	NZ	LYS	7		-23.594	22.961	1.00	0.00
ATOM	63	С	LYS	7		-20.614	17.402	1.00	0.00
ATOM	64	0	LYS	7		-21.595	16.693	1.00	0.00
ATOM	65	N	ARG	8		-19.453	16.911	1.00	0.00
ATOM	66	CA	ARG	8		-19.239	15.495	1.00	0.00
ATOM	67	CB	ARG	8	3.834	-17.849	15.296	1.00	0.00
ATOM	68	CG	ARG	8		-17.494	13.808	1.00	0.00
ATOM	69	CD	ARG	8	2.461	-16.607	13.565	1.00	0.00
ATOM	70	NE	ARG	8		-17.400	13.682	1.00	0.00
ATOM	71	CZ	ARG	8		-16.990	13.379	1.00	0.00
ATOM	72	NH1	ARG	8		-17.822	13.565	1.00	0.00
ATOM	73	NH2	ARG	8	-0.236	-15.769	12.889	1.00	0.00
ATOM	74	C	ARG	8	5.737	-19.425	14.683	1.00	0.00
ATOM	75	0	ARG	8	6.682	-18.653	14.834	1.00	0.00
ATOM	76	N	GLN	9	5.757	-20.451	13.827	1.00	0.00

209 ATOM 77 CA GLN 9 6.868 -20.810 12.963 CB7.228 -22.287 ATOM 78 GLN 9 ATOM 79 CG GLN 9 8.450 -22.675 ATOM 80 CD GLN 9 8.683 -24.179 8.069 -24.909 ATOM 81 OE1 GLN 9 ATOM 82 NE2 GLN 9 9.575 -24.647 С ATOM 83 GLN 9 6.479 -20.534 **ATOM** 0 GLN 84 9 5.880 -21.384 ATOM 85 N ALA 10 6.845 - 19.353CA ALA 10 6.575 - 18.996ATOM 86 ATOM 87 CB ALA 10 6.957 -17.536 C ALA 10 7.338 - 19.9468.703 1.00 0.00 ATOM 88 89 0 ALA 10 8.366 -20.507 9.085 1.00 0.00 ATOM TRP ATOM 90 N 11 6.824 - 20.1397.489 1.00 0.00 ATOM 91 CA TRP 11 7.434 - 21.0256.512 1.00 0.00 **ATOM** 92 CB TRP 11 6.419 - 21.3295.417 1.00 0.00 ATOM 93 CG TRP 11 5.310 -22.256 5.806 1.00 0.00 4.325 -22.004 CD1 TRP 6.696 1.00 0.00 ATOM 11 3.481 -23.091 6.787 1.00 0.00 ATOM 95 NE1 TRP 11 CE2 TRP 3.891 -24.106 5.947 1.00 0.00 ATOM 11 96 CZ2 TRP ATOM 97 11 3.384 -25.383 5.671 1.00 0.00CH2 TRP 4.049 -26.198 4.746 1.00 0.00 ATOM 98 11 0.00 1.00 CZ3 TRP 5.206 -25.732 4.102 ATOM 99 11 CE3 TRP 5.703 -24.447 4.381 1.00 0.00 ATOM 100 11 5.061 -23.601 5.311 1.00 0.00 ATOM 101 CD2 TRP 11 0.00 8.705 -20.402 5.939 1.00 C TRP ATOM 102 11 0 TRP 8.895 -19.187 6.001 1.00 0.00 ATOM 103 11 N 9.581 -21.247 5.392 1.00 0.00 104 LEU 12 ATOM ATOM 105 CA LEU 12 10.851 -20.829 4.827 1.00 0.00 CBLEU 12 11.859 -20.491 5.943 1.00 0.00 ATOM 106 ATOM 107 CG LEU 12 12.450 -21.698 6.700 1.00 0.00 108 CD1 LEU 12 13.476 -21.182 7.716 1.00 0.00 ATOM CD2 LEU 11.397 -22.532 7.442 1.00 0.00 **ATOM** 109 12 С 11.408 -21.862 3.868 1.00 0.00 ATOM 110 LEU 12 ATOM 0 LEU 12 10.969 -23.012 3.853 1.00 0.00 111 TRP 1.00 0.00 ATOM 112 N 13 12.395 -21.414 3.086 CA TRP 13.162 -22.114 2.121 1.00 0.00 ATOM 113 13 14.629 -21.952 1.00 0.00 ATOM 114 CBTRP 13 2:537 0.00 CG TRP 15.318 -21.663 1.294 1.00 ATOM 115 13 CD1 TRP 15.222 -20.464 0.728 1.00 0.00 ATOM 116 13 NE1 TRP 15.907 -20.467 -0.4411.00 0.00 ATOM 13 117 CE2 TRP 13 16.494 -21.704 -0.697 1.00 0.00 ATOM 118 CZ2 TRP 17.278 -22.238 -1.7351.00 0.00 ATOM 13 119 **ATOM** 120 CH2 TRP 13 17.688 -23.585 -1.6621.00 0.00 CZ3 TRP 13 17.312 -24.383 -0.5611.00 0.00 ATOM 121 ATOM 122 CE3 TRP 13 16.533 -23.837 0.469 1.00 0.00 16.113 -22.496 0.00 ATOM 123 CD2 TRP 13 0.425 1.00 ATOM 124 C TRP 13 12.873 -23.557 1.797 1.00 0.00

ATOM

**ATOM** 

125 0

126 N

TRP,

GLU

13

14

12.358 -23.866

13.285 -24.428

0.732

1.00

2.702 1.00 0.00

0.00

(106)

	211				(101)				י ביניוניו
ATOM	211	C.A	CI II	1.4	12 100	25 050	2 470	1 00	212
ATOM	127		GLU	14		-25.856		1.00	0.00
ATOM	128	CB	GLU	14		-26.622	3.409	1.00	0.00
ATOM	129	CG	GLU	14		-28.090	2.988	1.00	0.00
ATOM	130	CD	GLU	14		-28.979	3.272	1.00	0.00
ATOM	131	0E1		14		-29.908	2.466	1.00	0.00
ATOM	132	0E2		14		-28.722	4.296	1.00	0.00
ATOM	133	C	GLU	14		-26.290	2.502	1.00	0.00
ATOM	134	0	GLU	14	11.312	-27.033	1.619	1.00	0.00
ATOM	135	N	GLU	15	10.951	-25.810	3.475	1.00	0.00
ATOM	136	CA	GLU	15	9.548	-26.173	3.535	1.00	0.00
ATOM	137	CB	GLU	15	8.873	-25.657	4.814	1.00	0.00
MOTA	138	CG	GLU	15	9.486	-26.198	6.112	1.00	0.00
ATOM	139	CD	GLU	15	8.546	-25.966	7.294	1.00	0.00
ATOM	140	0E1	GLU	15	8.265	-24.784	7.594	1.00	0.00
ATOM	141	0E2	GLU	15	8.070	-26.973	7.868	1.00	0.00
ATOM	142	С	GLU	15	8.838	-25.680	2.271	1.00	0.00
ATOM	143	0	GLU	15	8.112	-26.440	1.633	1.00	0.00
ATOM	144	N	ASP	16		-24.414	1.899	1.00	0.00
ATOM	145	CA	ASP	16		-23.820	0.715	1.00	0.00
ATOM	146	СВ	ASP	16		-22.327	0.643	1.00	0.00
ATOM	147	CG	ASP	16		-21.504	1.667	1.00	0.00
ATOM	148		ASP	16		-21.842	1.929	1.00	0.00
ATOM	149		ASP	16		-20.492	2.144	1.00	0.00
ATOM	150	C	ASP	16		-24.523	-0.578	1.00	0.00
ATOM	151	0	ASP	16		-25.003	-1.323	1.00	0.00
ATOM	152	N	LYS	17		-24.567	-0.853	1.00	0.00
ATOM	153	CA	LYS	17		-25.173	-2.040	1.00	0.00
ATOM	154	CB	LYS	17		-25.038	-1.942	1.00	0.00
ATOM	155	CG	LYS	17		-25.517	-3.187	1.00	0.00
ATOM	156	CD	LYS	17		-25.346	-2.941	1.00	0.00
ATOM	157	CE	LYS	17		-25.843	-4.112	1.00	0.00
ATOM	158	NZ	LYS	17		-25.018	-5.323	1.00	0.00
ATOM	159	C	LYS	17		-26.630	-2.183	1.00	0.00
ATOM	160	0	LYS	17		-27.043	-3.254	1.00	0.00
ATOM	161	N	ASN	18		-27.408		1.00	
ATOM	162	CA	ASN	18		-28.810	-1.104	1.00	0.00
ATOM	163	CB	ASN	18			-1.100		0.00
	164					-29.475	0.194	1.00	0.00
ATOM		CG	ASN	18		-30.998	0.146	1.00	0.00
ATOM	165		ASN	18		-31.592	-0.768	1.00	0.00
ATOM	166		ASN	18		-31.638	1.133	1.00	0.00
ATOM	167	C	ASN	18		-28.951	-1.338	1.00	0.00
ATOM	168	0	ASN	18		-29.770	-2.157	1.00	0.00
ATOM	169	N	LEU	19		-28.149	-0.660	1.00	0.00
ATOM	170	CA	LEU	19		-28.186	-0.846	1.00	0.00
ATOM	171	CB	LEU	19		-27.179	0.087	1.00	0.00
ATOM	172	CG	LEU	19		-27.144	-0.085	1.00	0.00
ATOM	173		LEU	19		-28.525	0.170	1.00	0.00
ATOM	174		LEU	19		-26.120	0.879	1.00	0.00
ATOM	175	C	LEU	19		-27.911	-2.310	1.00	0.00
ATOM	176	0	LEU	19	5.113	-28.638	-2.903	1.00	0.00

	213									214
ATOM	177	N	ARG	20		6.514	-26.869	-2.892	1.00	0.00
ATOM	178	CA	ARG	20		6.316	-26.480	-4.280	1.00	0.00
ATOM	179	CB	ARG	20		7.241	-25.300	-4.611	1.00	0.00
ATOM	180	CG	ARG	20		6.807	-24.570	-5.885	1.00	0.00
ATOM	181	CD	ARG	20			-23.475	-6.236	1.00	0.00
ATOM	182	NE	ARG	20			-22.356	-6.952	1.00	0.00
ATOM	183	CZ	ARG	20			-21.335	-6.359	1.00	0.00
ATOM	184	NH1		20			-21.301	-5.028	1.00	0.00
ATOM	185	NH2		20			-20.342	-7.102	1.00	0.00
ATOM	186	C	ARG	20			-27.688	-5.178	1.00	0.00
ATOM	187	0	ARG	20			-28.013	-6.050	1.00	0.00
ATOM	188	N	SER	21			-28.367	-4.942	1.00	0.00
ATOM	189	CA	SER	21			-29.561	-5.692	1.00	0.00
ATOM	190	СВ	SER	21			-30.080	-5.270	1.00	0.00
ATOM	191	OG	SER	21			-31.043	-6.205	1.00	0.00
ATOM	192	С	SER	21		6.993	-30.623	-5.499	1.00	0.00
ATOM	193	0	SER	21			-31.207	-6.473	1.00	0.00
ATOM	194	N	GLY	22			-30.858	-4.251	1.00	0.00
ATOM	195	CA	GLY	22	•		-31.813	-3.883	1.00	0.00
ATOM	196	C	GLY	22		4.276	-31.616	-4.716	1.00	0.00
ATOM	197	0	GLY	22		3.773	-32.571	-5.305	1.00	0.00
ATOM	198	N	VAL	23		3.769	-30.379	-4.779	1.00	0.00
ATOM	199	CA	VAL	23		2.583	-30.060	-5.561	1.00	0.00
ATOM	200	CB	VAL	23		2.141	-28.605	-5.326	1.00	0.00
ATOM	201	CG1	VAL	23		0.953	-28.252	-6.232	1.00	0.00
ATOM	202	CG2	VAL	23		1.700	-28.422	-3.872	1.00	0.00
ATOM	203	C	VAL	23		2.849	-30.342	-7.039	1.00	0.00
ATOM	204	0	VAL	23		2.011	-30.930	-7.713	1.00	0.00
ATOM	205	N	ARG	24		4.012	-29.937	-7.557	1.00	0.00
ATOM	206	CA	ARG	24		4.348	-30.180	-8.953	1.00	0.00
ATOM	207	CB	ARG	24		5.645	-29.431	-9.296	1.00	0.00
ATOM	208	CG	ARG	24		6.038	-29.489	-10.782	1.00	0.00
ATOM	209	CD	ARG	24			-29.050		1.00	0.00
ATOM	210	NE	ARG	24			-27.741		1.00	0.00
ATOM	211	CZ	ARG	24			-27.209		1.00	0.00
ATOM	212		ARG	24			-27.852		1.00	0.00
ATOM	213		ARG	24			-26.027		1.00	0.00
ATOM	214	С	ARG	24			-31.684		1.00	0.00
ATOM	215	0	ARG	24			-32.103		1.00	0.00
ATOM	216	N	LYS	25			-32.490		1.00	0.00
ATOM	217	CA	LYS	25			-33.930	-8.409	1.00	0.00
ATOM	218	CB	LYS	25			-34.426	-7.298	1.00	0.00
ATOM	219	CG	LYS	25 25			-33.852	-7.397	1.00	0.00
ATOM	220	CD	LYS	25 25			-34.895	-7.912 -9.063	1.00	0.00
ATOM	221	CE NZ	LYS	25 25			-34.307 -33.762	-8.063 -6.794	1.00	0.00 0.00
ATOM ATOM	222 223	NZ C	LYS LYS	25 25			-33.762 -34.719	-8.338	1.00	0.00
ATOM ATOM	223	0	LYS	25 25			-34.719 -35.541	-9.214	1.00	0.00
ATOM	224	N	TYR	25 26			-34.512	-7.277	1.00	0.00
ATOM	226	CA	TYR	26			-35.267		1.00	0.00
AIUM	220	VΛ	111	20		1.123	00.201	, .010	1.00	0.00

					(109)			特開と
	215							216
ATOM	227	CB	TYR	26	1.838 -35.862	-5.604	1.00	0.00
ATOM	228	CG	TYR	26	3.188 -36.499	-5.318	1.00	0.00
ATOM	229	CD1	TYR	26	3.622 -37.605	-6.072	1.00	0.00
ATOM	230	CE1	TYR	26	4.876 -38.187	-5.816	1.00	0.00
ATOM	231	CZ	TYR	26	5.703 -37.663	-4.806	1.00	0.00
ATOM	232	OH	TYR	26	6.920 -38.221	-4.552	1.00	0.00
ATOM	233	CE2	TYR	26	5.271 -36.560	-4.052	1.00	0.00
ATOM	234	CD2	TYR	26	4.018 -35.980	-4.308	1.00	0.00
ATOM	235	С	TYR	26	0.426 -34.484	-7.203	1.00	0.00
ATOM	236	0	TYR	26	-0.649 -35.047	-6.993	1.00	0.00
ATOM	237	N	GLY	27	0.495 -33.210	-7.603	1.00	0.00
ATOM	238	CA	GLY	27	-0.674 -32.370	-7.828	1.00	0.00
ATOM	239	С	GLY	27	-1.229 -31.785	-6.529	1.00	0.00
ATOM	240	0	GLY	27	-0.884 -32.229	-5.433	1.00	0.00
ATOM	241		GLU	28	-2.104 -30.780		1.00	0.00
ATOM	242	CA	GLU	28	-2.752 -30.135		1.00	0.00
ATOM	243	CB	GLU	28	-3.332 -28.776		1.00	0.00
ATOM	244	CG	GLU	28	-3.737 -27.928		1.00	0.00
ATOM	245	CD	GLU	28	-4.217 -26.527		1.00	0.00
ATOM	246		GLU	28	-3.685 -25.936		1.00	0.00
ATOM	247		GLU	28	-5.079 -26.007		1.00	0.00
ATOM	248	C	GLU	28	-3.822 -31.093		1.00	0.00
ATOM	249	0	GLU	28	-4.355 -31.910		1.00	0.00
ATOM	250	N	GLY	29	-4.130 -31.009		1.00	0.00
ATOM	251	CA	GLY	29	-5.115 -31.885		1.00	0.00
ATOM	252	C	GLY	29	-4.595 -33.314		1.00	0.00
ATOM	253	0	GLY	29	-5.319 -34.264		1.00	0.00
ATOM	254	N	ASN	30	-3.325 -33.446		1.00	0.00
ATOM	255	CA	ASN	30	-2.639 -34.719		1.00	0.00
ATOM	256	CB	ASN	30	-2.029 -35.113		1.00	0.00
ATOM	257	CG	ASN	30	-1.826 -36.615		1.00	0.00
ATOM	258		ASN	30	-1.898 -37.373		1.00	0.00
ATOM	259		ASN	30	-1.595 -37.059			
ATOM	260	C	ASN	30	-1.593 -34.555		1.00	0.00
ATOM	261	0	ASN	30	-0.469 -35.054		1.00	0.00
ATOM	262	N	TRP	31	-1.984 -33.824		1.00	0.00
ATOM	263	CA	TRP	31	-1.147 -33.508		1.00	0.00
ATOM	264	СВ	TRP	31	-1.810 -32.452		1.00	0.00
ATOM	265	CG	TRP	31	-2.477 -31.383		1.00	0.00
ATOM	266		TRP	31	-3.808 -31.193		1.00	0.00
ATOM	267		TRP	31	-4.059 -30.138		1.00	0.00
ATOM	268		TRP	31	-2.882 -29.590		1.00	0.00
ATOM	269		TRP	31	-2.604 -28.531		1.00	0.00
ATOM	270		TRP	31	-1.267 -28.222		1.00	0.00
ATOM	271		TRP	31	-0.230 -28.964		1.00	0.00
ATOM	272		TRP		-0.520 -30.027		1.00	0.00
ATOM	273		TRP		-1.854 -30.367		1.00	0.00
ATOM	274	C	TRP		-0.726 -34.778		1.00	0.00
ATOM	275	0	TRP		0.365 -34.813		1.00	0.00
ATOM	276	N	SER		-1.554 -35.829		1.00	0.00
	- · <del>-</del>							

	217				(110)			218	
ATOM	277	CA	SER	32	-1.220 -37.11	3 2.127	1 00	0.00	
ATOM	278		SER	32	-2.344 -38.12		1.00	0.00	
ATOM	279	OG	SER	32	-3.575 -37.63		1.00	0.00	
ATOM	280	C	SER	32	0.102 -37.62		1.00	0.00	
ATOM	281	0	SER	32	1.064 -37.85		1.00	0.00	
ATOM	282	N	LYS	33	0.155 -37.78		1.00	0.00	
ATOM	283		LYS	33	1.351 -38.25		1.00	0.00	
ATOM .	284	СВ	LYS	33	1.082 -38.48		1.00	0.00	
ATOM	285		LYS	33	0.191 -39.72		1.00	0.00	
ATOM	286	CD	LYS	33	-0.036 -40.04		1.00	0.00	
ATOM	287		LYS	33	1.019 -40.96		1.00	0.00	
ATOM	288	NZ	LYS	33	2.347 -40.33		1.00	0.00	
ATOM	289	C	LYS	33	2.505 -37.27		1.00	0.00	
ATOM	290	0	LYS	33	3.596 -37.70		1.00	0.00	
ATOM	291	N	ILE	34	2.272 -35.98			0.00	
ATOM	292	CA	ILE	34	3.300 -34.95		1.00	0.00	
ATOM	293	СВ	ILE	34	2.709 -33.55			0.00	
ATOM	294	CG2		34	3.704 -32.46		1.00	0.00	
ATOM	295		ILE	34	2.328 -33.37			0.00	
ATOM	296		ILE	34	1.393 -32.18		1.00	0.00	
ATOM	297	С	ILE	34	3.969 -35.10		1.00	0.00	
ATOM	298	0	ILE	34	5.188 -35.20		1.00	0.00	
ATOM	299	N	LEU	35	3.175 -35.13			0.00	
ATOM	300	CA	LEU	35	3.637 -35.27	9 3.476	1.00	0.00	
ATOM	301	CB	LEU	35	2.431 -35.14	8 4.418	1.00	0.00	
ATOM	302	CG	LEU	35	2.764 -35.24	4 5.918	1.00	0.00	
ATOM	303	CD1	LEU	35	3.814 -34.21	6 6.357	1.00	0.00	
ATOM	304	CD2	LEU	35	1.477 -35.01	6 6.719	1.00	0.00	
ATOM	305	C	LEU	35	4.377 -36.60	00 3.698	1.00	0.00	
ATOM	306	0	LEU	35	5.385 -36.63	3 4.403	1.00	0.00	
ATOM	307	N	LEU	36	3.886 -37.70	00 3.114	1.00	0.00	
ATOM	308	CA	LEU	36	4.520 -39.00	00 3.275	1.00	0.00	
ATOM	309	CB	LEU	36	3.651 -40.11	2.666	1.00	0.00	
ATOM	310		LEU	36	2.428 -40.46	3.532	1.00	0.00	
ATOM	311		LEU	36	1.382 -41.19		1.00	0.00	
ATOM	312		LEU	36	2.816 -41.35		1.00	0.00	
ATOM	313	C	LEU	36	5.921 -38.99			0.00	
ATOM	314	0	LEU	36	6.892 -39.29		1.00	0.00	
ATOM	315	N	HIS	37	6.020 -38.67		1.00		
ATOM	316	CA	HIS	37	7.276 -38.64			•	
ATOM	317	CB	HIS	37	6.991 -38.45				
ATOM	318	CG	HIS	37	6.042 -39.47				
ATOM	319		HIS	37	6.292 -40.84				
ATOM	320		HIS	37	5.250 -41.45				
ATOM	321		HIS	37 27	4.316 -40.59				
ATOM	322		HIS	37 37	4.827 -39.35				
ATOM	323	C 0	HIS HIS	37 37	8.232 -37.56				
ATOM ATOM	324 325	N	TYR	37 38	9.391 -37.85 7.747 -36.32				
ATOM ATOM	326	N CA	TYR	38	8.497 -35.16				
AIUM	320	UH	111	J0	0.431 -33.10	JO 1.00Z	1.00	0.00	

219 220 **ATOM** 327 CB TYR 38 8.349 -34.067 0.597 1.00 0.00 ATOM 328 CG TYR 38 8.795 -34.477 -0.7971.00 0.00 ATOM 329 CD1 TYR 38 7.941 -34.291 -1.9021.00 0.00 330 CE1 TYR 38 8.357 -34.673 -3.1911.00 0.00 ATOM ATOM CZ TYR 38 9.626 -35.245 -3.3771.00 0.00 331 ATOM 332 OH TYR 38 10.034 -35.619 -4.6261.00 0.00 ATOM 333 CE2 TYR 38 10.481 -35.431 -2.2791.00 0.00 CD2 TYR 10.067 -35.048 -0.993ATOM 334 38 1.00 0.00 C TYR ATOM 335 38 7.973 - 34.6813.012 1.00 0.00 0 TYR 6.847 -34.201 0.00 ATOM 336 38 3.109 1.00 N LYS 8.790 -34.812 0.00 ATOM 337 39 4.059 1.00 CA LYS 8.412 -34.392 0.00 ATOM 338 39 5.398 1.00 CBLYS 9.006 -35.351 0.00 ATOM 339 39 6.436 1.00 CG LYS 39 8.614 -36.788 6.059 1.00 0.00 ATOM 340 CDLYS 8.595 -37.722 7.274 1.00 0.00 ATOM 341 39 LYS ATOM 342 CE 39 8.264 -39.166 6.871 1.00 0.00 NZ LYS 6.997 -39.275 1.00 ATOM 343 39 6.120 0.00 C LYS 39 8.789 -32.926 0.00 ATOM 344 5.619 1.00 ATOM 0 LYS 9.577 -32.361 4.863 1.00 0.00 345 39 PHE **ATOM** 346 N 40 8.198 -32.321 6.652 1.00 0.00 ATOM 347 CAPHE 40 8.382 -30.924 7.023 1.00 0.00 CBPHE 7.158 -30.140 1.00 0.00 ATOM 348 40 6.536 ATOM 349 CG PHE 40 6.832 -30.297 5.064 1.00 0.00 CD1 PHE ATOM 350 40 5.945 -31.298 4.627 1.00 0.00 ATOM 351 CE1 PHE 40 5.651 -31.431 3.259 1.00 0.00 CZ PHE 6.240 -30.565 1.00 0.00 ATOM 352 40 2.321 ATOM 353 CE2 PHE 40 7.128 -29.567 2.757 1.00 0.00 ATOM 354 CD2 PHE 40 -7.421 - 29.4344.124 1.00 0.00 ATOM 355 C PHE 40 8.535 -30.832 8.545 1.00 0.00 0 PHE ATOM 356 40 8.686 -31.863 9.200 1.00 0.00 ATOM 357 N ASN 41 8.488 -29.622 9.119 1.00 0.00 ATOM CAASN 8.618 -29.440 10.562 1.00 0.00 358 41 CBASN 8.677 -27.943 ATOM 359 41 10.891 1.00 0.00 CG ASN 8.855 -27.704 12.387 ATOM 360 41 1.00 0.00 9.974 -27.556 OD1 ASN 41 12.872 1.00 0.00 ATOM 361 ND2 ASN 7.753 -27.636 13.133 ATOM 362 1.00 0.00 41 ATOM C ASN 7.480 -30.160 11.298 1.00 0.00 363 41 ATOM 364 0 ASN 41 7.706 - 31.17511.953 1.00 0.00 N ASN 6.256 - 29.6360.00 ATOM 365 42 11.176 1.00 ATOM 366 CA ASN 42 5.031 -30.174 11.765 1.00 0.00 **ATOM** 367 CBASN 42 4.871 -29.750 13.238 1.00 0.00 ATOM 368 CG ASN 42 5.851 -30.429 14.192 1.00 0.00 OD1 ASN 6.672 -29.768 14.822 ATOM 369 42 1.00 0.00 ATOM 370 ND2 ASN 42 5.752 -31.752 14.330 1.00 0.00 ATOM 371 C ASN 42 3.879 -29.639 10.914 1.00 0.00 ASN 2.930 -29.044 0.00 ATOM 372 0 42 11.422 1.00 ATOM 373 N ARG 3.992 -29.830 9.596 1.00 0.00 43 ATOM 374 CA ARG 43 3.028 -29.333 8.631 1.00 0.00 ATOM 375 CBARG 43 3.761 -28.822 7.384 1.00 0.00 376 ATOM CG ARG 4.930 -27.881 7.732 1.00 0.00 43

	221							222
ATOM	377	CD	ARG	43	4.512 -26.708	8.624	1.00	0.00
ATOM	378	NE	ARG	43	5.570 -25.689	8.695	1.00	0.00
ATOM	379	CZ	ARG	43	5.401 -24.472	9.236	1.00	0.00
ATOM	380	NH1	ARG	43	6.385 -23.571	9.171	1.00	0.00
ATOM	381		ARG	43	4.240 -24.175	9.834	1.00	0.00
ATOM	382	C	ARG	43	1.974 -30.390	8.308	1.00	0.00
ATOM	383	0	ARG	43	2.223 -31.318	7.543	1.00	0.00
ATOM	384	N	THR	44	0.790 -30.224	8.901	1.00	0.00
ATOM	385	CA	THR	44	-0.370 -31.081	8.721	1.00	0.00
ATOM	386	CB	THR	44	-1.399 -30.715	9.803	1.00	0.00
ATOM	387		THR	44	-0.844 -30.925	11.216	1.00	0.00
ATOM	388		THR	44	-1.785 -29.360	9.639	1.00	0.00
ATOM	389	C	THR	44	-0.989 -30.831	7.344	1.00	0.00
ATOM	390	0	THR	44	-0.558 -29.941	6.615	1.00	0.00
ATOM	391	N	SER	45	-2.035 -31.589	7.001	1.00	0.00
ATOM	392	CA	SER	45	-2.777 -31.420	5.760	1.00	0.00
ATOM	393	CB	SER	45	-3.929 -32.429	5.749	1.00	0.00
ATOM	394	OG	SER	45	-4.576 -32.438	7.008	1.00	0.00
ATOM	395	С	SER	45	-3.286 -29.975	5.678	1.00	0.00
ATOM	396	0	SER	45	-3.179 -29.330	4.637	1.00	0.00
ATOM	397	N	VAL	46	-3.819 -29.473	6.798	1.00	0.00
ATOM	398	CA	VAL	46	-4.330 -28.118	6.941	1.00	0.00
ATOM	399	CB	VAL	46	-4.956 -27.937	8.336	1.00	0.00
ATOM	400	CG1	VAL	46	-5.452 -26.500	8.544	1.00	0.00
ATOM	401	CG2	VAL	46	-6.138 -28.894	8.539	1.00	0.00
ATOM	402	C	VAL	46	-3.205 -27.108	6.687	1.00	0.00
ATOM	403	0	VAL	46	-3.377 -26.198	5.878	1.00	0.00
ATOM	404	N	MET	47	-2.061 -27.262	7.368	1.00	0.00
ATOM	405	CA	MET	47	-0.916 -26.367	7.208	1.00	0.00
ATOM	406	CB	MET	47	0.238 -26.840	8.098	1.00	0.00
MOTA	407	CG	MET	47	-0.003 -26.623	9.593	1.00	0.00
ATOM	408	SD	MET	47	0.444 -24.972	10.184	1.00	0.00
ATOM	409	CE	MET	47	0.248 -25.243	11.960	1.00	0.00
ATOM	410	C	MET	47	-0.460 -26.319	5.745	1.00	0.00
ATOM	411	0	MET	47	-0.295 -25.238	5.181	1.00	0.00
ATOM	412	N	LEU	48	-0.255 -27.494	5.140	1.00	0.00
ATOM	413	CA	LEU	48	0.176 -27.649	3.756	1.00	0.00
ATOM	414	CB	LEU	48	0.264 -29.146	3.405	1.00	0.00
ATOM	415	CG	LEU	48	1.419 -29.856	4.131	1.00	0.00
ATOM	416		LEU	48	1.191 -31.369	4.201	1.00	0.00
ATOM	417		LEU	48	2.745 -29.621	3.406	1.00	0.00
ATOM	418	C	LEU	48	-0.792 -26.923	2.823	1.00	0.00
ATOM	419	0 N	LEU	48	-0.371 -26.112	1.996	1.00	0.00
ATOM	420	N CA	LYS	49 40	-2.091 -27.210	2.970	1.00	0.00
ATOM	421	CA	LYS	49 40	-3.141 -26.600	2.173	1.00	0.00
ATOM	422	CB CG	LYS	49 40	-4.517 -27.118 -5.675 -26.409	2.629	1.00	0.00
ATOM ATOM	423 424	CD	LYS LYS	49 49	-5.675 -26.498 -5.758 -27.112	1.827 0.427	1.00	0.00
ATOM	424	CE	LYS	49 49	-5.158 -21.112 -5.924 -26.080	-0.696	1.00	0.00
ATOM	425	NZ	LYS	49	-6.213 -26.751	-1.978	1.00	0.00
AIUM	470	IVL	LIO	73	0.610 60.131	1.310	1.00	0.00

	223							224
ATOM	427	C	LYS	49	-3.095 -25.080	2.282	1.00	0.00
ATOM	428	0 .	LYS	49	-3.056 -24.399	1.260	1.00	0.00
ATOM	429	N	ASP	50	-3.128 -24.547	3.508	1.00	0.00
ATOM	430	CA	ASP ·	50	-3.142 -23.111	3.723	1.00	0.00
ATOM	431	CB	ASP	50	-3.385 -22.769	5.191	1.00	0.00
ATOM	432	CG	ASP	50	-3.697 -21.284	5.335	1.00	0.00
ATOM	433		ASP	50	-2.991 -20.623	6.124	1.00	0.00
ATOM	434		ASP	50	-4.665 -20.835	4.680	1.00	0.00
ATOM	435	C	ASP	50	-1.892 -22.429	3.171	1.00	0.00
ATOM	436		ASP	50	-2.002 -21.382		1.00	0.00
ATOM	437	N	ARG	51	-0.703 -23.008	3.378	1.00	0.00
ATOM	438	CA	ARG	51	0.511 -22.410		1.00	0.00
ATOM	439	СВ	ARG	51	1.762 -23.186	3.268	1.00	0.00
ATOM	440	CG	ARG	51	3.039 -22.576		1.00	0.00
ATOM	441	CD	ARG	51	3.255 -21.127		1.00	0.00
ATOM	442	NE	ARG	51	4.588 -20.625	2.755	1.00	0.00
ATOM	443	CZ	ARG	51	4.967 -19.337	2.806	1.00	0.00
ATOM	444		ARG	51	4.098 -18.389	3.167	1.00	0.00
ATOM	445		ARG	51 ·	6.226 -18.988	2.514	1.00	0.00
ATOM	446	С	ARG	51	0.412 -22.342	1.322	1.00	0.00
ATOM	447	0	ARG	51	0.641 -21.286	0.733	1.00	0.00
ATOM	448	N	TRP		0.062 -23.465	0.682	1.00	0.00
ATOM	449	CA	TRP	52		-0.762	1.00	0.00
ATOM	450	CB	TRP	52	-0.345 -24.880	-1.298	1.00	0.00
ATOM	451	CG	TRP	52	-0.473 -24.892	-2.791	1.00	0.00
ATOM	452		TRP	52	-1.600 -25.165	-3.481	1.00	0.00
ATOM	453	NE1	TRP	52	-1.357 -25.079		1.00	0.00
ATOM	454	CE2	TRP	52	-0.043 -24.735	-5.085	1.00	0.00
ATOM	455	CZ2	TRP	52	0.687 -24.524	-6.265	1.00	0.00
ATOM	456	CH2	TRP	52	2.045 -24.179	-6.178	1.00	0.00
ATOM	457	CZ3	TRP	52	2.654 -24.046	-4.920	1.00	0.00
ATOM	458	CE3	TRP	52	1.914 -24.259	-3.742	1.00	0.00
ATOM	459	CD2	TRP	52	0.547 -24.609	-3.793	1.00	0.00
ATOM	460	C	TRP	52	-1.161 -22.504	-1.213	1.00	0.00
ATOM	461	0	TRP	52	-1.020 -21.894	-2.266	1.00	0.00
ATOM	462	N	ARG	53	-2.230 -22.340	-0.429	1.00	0.00
ATOM	463	CA	ARG	53	-3.306 -21.412	-0.736	1.00	0.00
ATOM	464	CB	ARG	53	-4.445 -21.596	0.267	1.00	0.00
ATOM	465	CG	ARG	53	-5.573 -20.582	0.063	1.00	0.00
ATOM	466	CD	ARG	53	-6.812 -21.049	0.827	1.00	0.00
ATOM	467	NE	ARG	53	-6.562 -21.201	2.272	1.00	0.00
ATOM	468	CZ	ARG	53	-7.342 -21.914	3.101	1.00	0.00
ATOM	469		ARG	53	-8.317 -22.690	2.622	1.00	0.00
ATOM	470		ARG	53	-7.140 -21.846	4.421	1.00	0.00
ATOM	471	C	ARG	53	-2.753 -19.987	-0.741	1.00	0.00
ATOM	472	0	ARG	53	-3.057 -19.215	-1.647	1.00	0.00
ATOM	473	N	THR	54	-1.925 -19.641	0.251	1.00	0.00
ATOM	474	CA	THR	54 54	-1.298 -18.331	0.332	1.00	0.00
ATOM	475	CB	THR	54	-0.479 -18.217	1.624	1.00	0.00
ATOM	476	662	? THR	54	0.209 - 16.854	1.732	1.00	0.00

	225				<b>(</b> ,			226
ATOM	477	061	THR	54	-1.338 -18.388	2.732	1.00	0.00
ATOM	478	C	THR	54	-0.424 -18.117		1.00	0.00
ATOM	479	0	THR	54	-0.525 -17.078	-1.551	1.00	0.00
ATOM	480	N	MET	55	0.425 -19.098	-1.239	1.00	0.00
ATOM	481	CA	MET	55 55	1.311 -19.033	-2.395	1.00	0.00
ATOM	482	CB	MET	55 55	2.149 -20.324	-2.470	1.00	0.00
ATOM	483	CG	MET	55 55		-3.073	1.00	0.00
ATOM	484	SD	MET	55 55	3.651 -19.184	-4.635	1.00	0.00
ATOM	485	CE	MET	55	2.729 -20.278	-5.740	1.00	0.00
ATOM	486	C	MET	55 55	0.486 -18.809	-3.670	1.00	0.00
ATOM	487	0	MET	55 		-4.444	1.00	0.00
ATOM	488	N	LYS	56	-0.524 -19.663		1.00	0.00
ATOM	489	CA	LYS	-56	-1.455 -19.643		1.00	0.00
ATOM	490	CB	LYS	56	-2.551 -20.696	-4.744	1.00	0.00
ATOM	491	CG	LYS	56	-3.673 -20.733		1.00	0.00
ATOM	492	CD	LYS	56	-5.012 -21.126	-5.149	1.00	0.00
ATOM	493	CE	LYS	56	-5.056 -22.558	-4.600	1.00	0.00
ATOM	494	NZ	LYS	56	-5.131 -23.573	-5.667	1.00	0.00
. ATOM	495	C	LYS	56	-2.028 -18.233	-5.118	1.00	0.00
ATOM	496	0	LYS	56	-1.964 -17.654		1.00	0.00
ATOM	497	N	LYS	57	-2.572 -17.690	-4.026	1.00	0.00
ATOM	498	CA	LYS	57	-3.148 -16.355	-3.971	1.00	0.00
ATOM	499	CB	LYS	57	-3.737 -16.135	-2.563	1.00	0.00
ATOM	500	CG	LYS	57	-4.216 -14.700	-2.280	1.00	0.00
ATOM	501	CD	LYS	57	-3.156 -13.782	-1.637	1.00	0.00
ATOM	502	CE	LYS	57	-2.945 -14.069	-0.143	1.00	0.00
ATOM	503	NZ	LYS	57	-1.906 -13.202	0.446	1.00	0.00
ATOM	504	C	LYS	57	-2.113 -15.284	-4.332	1.00	0.00
ATOM	505	0	LYS	57	-2.428 -14.342	-5.053	1.00	0.00
ATOM	506	N	LEU	58	-0.892 -15.419	-3.806	1.00	0.00
ATOM	507	CA	LEU	58	0.192 -14.468	-3.998	1.00	0.00
ATOM	508	CB	LEU	58	1.334 -14.822	-3.026	1.00	0.00
ATOM	509	CG	LEU	58	2.502 -13.827	-2.913	1.00	0.00
ATOM	510	CD1	LEU	58	3.459 -13.863	-4.112	1.00	0.00
ATOM	511	CD2	LEU	58	2.030 -12.395	-2.638	1.00	0.00
ATOM	512	C	LEU	58	0.638 -14.384	-5.458	1.00	0.00
ATOM	513	0	LEU	58	0.570 -13.312	-6.055	1.00	0.00
ATOM	514	N	LYS	59	1.112 -15.494	-6.036	1.00	0.00
ATOM	515	CA	LYS	59	1.602 -15.505	-7.409	1.00	0.00
ATOM	516	CB	LYS	59	2.545 -16.703	-7.618	1.00	0.00
ATOM	517	CG	LYS	59	3.262 -16.674	-8.983	1.00	0.00
ATOM	518	CD	LYS	59	2.440 -17.297	-10.129	1.00	0.00
ATOM	519	CE	LYS	59	2.451 -16.431	-11.398	1.00	0.00
ATOM	520	NZ	LYS	59	1.404 -16.849	-12.351	1.00	0.00
ATOM	521	C	LYS	59	0.468 -15.504		1.00	0.00
ATOM	522	0	LYS	59	0.566 -14.815		1.00	0.00
ATOM	523	N	LEU	60	-0.573 -16.305		1.00	0.00
ATOM	524	CA	LEU	60	-1.739 -16.523		1.00	0.00
ATOM	525	CB	LEU	60	-2.287 -15.243		1.00	0.00
ATOM	526	CG	LEU	60	-3.660 -15.450	-10.352	1.00	0.00

```
227
ATOM
        527
             CD1 LEU
                                 -4.759 -15.841 -9.354 1.00 0.00
                         60
             CD2 LEU
ATOM
        528
                         60
                                 -4.063 -14.147 -11.047
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        529
             C
                 LEU
                         60
                                 -1.422 -17.641 -10.018
                                                         1.00
                                                                0.00
        530 0
                 LEU
                                 -1.089 -17.384 -11.175
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
                         60
             N
                  ILE
                                 -1.524 -18.885 -9.536
                                                                0.00
ATOM
        531
                         61
                                                         1.00
                                                         1.00
             CA
                 ILE
                                 -1.287 -20.100 -10.311
                                                                0.00
ATOM
        532
                         61
ATOM
        533
             CB
                 ILE
                         61
                                 -0.441 -21.107 -9.505
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        534
             CG2 ILE
                                 -0.434 -22.497 -10.166
                                                         1.00
ATOM
        535
             CG1 ILE
                         61
                                  0.990 -20.546 -9.400
                                                         1.00 0.00
             CD1 ILE
ATOM
        536
                         61
                                  1.991 -21.508 -8.757
                                                          1.00
                                                                0.00
             C
                  ILE
ATOM
        537·
                         61
                                 -2.625 -20.682 -10.777
                                                          1.00
                                                                0.00
             0
                  ILE
ATOM
        538
                         61
                                 -2.720 -21.193 -11.891
                                                          1.00
                                                                0.00
        539
             N
                  SER
                                 -3.663 -20.607 -9.933
ATOM
                         62
                                                          1.00
                                                                0.00
             CA
                 SER-
                         62
                                 -4.992 -21.124 -10.250
                                                                0.00
ATOM
        540
                                                          1.00
ATOM
             CB
                  SER
                         62
                                 -5.967 -20.767 -9.123
                                                                0.00
        541
                                                          1.00
                  SER
ATOM
             0G
                         62
                                                                0.00
        542
                                 -7.160 -21.514 -9.243
                                                          1.00
             C
                  SER
                         62
ATOM
        543
                                 -5.494 -20.591 -11.595
                                                          1.00
                                                                0.00
             0
                  SER
ATOM
         544
                         62
                                 -6.107 -21.332 -12.358
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
             N
                  SER
         545
                         63
                                 -5.220 -19.309 -11.866
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         546
             CA
                  SER
                         63
                                . -5.598 -18.617 -13.087
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         547
             CB
                  SER
                                 -6.677 -17.583 -12.735
                         63
                                                          1.00
                                                                0.00
             0G
                  SER
ATOM
         548
                         63
                                 -7.866 -18.263 -12.391
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         549
             C
                  SER
                         63
                                 -4.351 -17.997 -13.723
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             0
                  SER
         550
                         63
                                 -4.375 -16.840 -14.139
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         551
             N
                  ASP
                                 -3.265 -18.784 -13.788
                         64
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         552
             CA ASP
                         64
                                 -1.979 -18.374 -14.341
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
         553
              CB
                 ASP
                         64
                                 -0.981 -19.546 -14.281
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         554
              CG
                  ASP
                         64
                                  0.462 -19.067 -14.355
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         555
              OD1 ASP
                         64
                                  0.802 -18.394 -15.349
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         556
              OD2 ASP
                                  1.200 -19.333 -13.379
                                                          1.00
                                                                0.00
                         64
ATOM
         557
              C
                  ASP
                         64
                                 -2.139 -17.843 -15.766
                                                          1.00
                                                                0.00
                  ASP
ATOM
         558
              0
                         64
                                 -1.996 -16.647 -16.006
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         559
              N
                  SER
                         65
                                 -2.449 -18.739 -16.707
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
              CA
                  SER
         560
                         65
                                 -2.637 -18.409 -18.112
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  SER
ATOM
         561
             CB
                         65
                                 -2.159 -19.591 -18.964
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             0G
                  SER
         562
                         65
                                 -0.877 -20.014 -18.541
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             C
                  SER
         563
                         65
                                 -4.105 -18.067 -18.381
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
              0
                  SER
                                 -4.700 -18.598 -19.318
         564
                         65
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         565
              N
                  GLU
                         66
                                 -4.679 -17.188 -17.552
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         566
              CA
                  GLU
                                 -6.065 -16.750 -17.651
                         66
                                                          1.00
                                                                0.00
                  GLU
ATOM
         567
              CB
                         66
                                 -6.952 -17.538 -16.675
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         568
              CG
                  GLU
                         66
                                 -6.910 -19.060 -16.863
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         569
              CD GLU
                                 -7.909 -19.780 -15.957
                         66
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         570
              OE1 GLU
                         66
                                 -8.308 -19.179 -14.931
                                                          1.00
                                                                0.00
              OE2 GLU
ATOM
         571
                         66
                                  -8.255 -20.929 -16.303
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         572
              C
                  GLU
                         66
                                  -6.154 -15.255 -17.339
                                                          1.00
                                                                0.00
              0
                  GLU
ATOM
         573
                         66
                                  -6.713 -14.496 -18.129
                                                          1.00
                                                                 0.00
              N
                  ASP
ATOM
         574
                         67
                                 -5.611 -14.851 -16.184
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         575
              CA ASP
                         67
                                  -5.611 -13.471 -15.723
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         576
              CB ASP
                         67
                                  -5.278 -13.461 -14.227 1.00 0.00
```

	229				(525)	220	
ATOM	577	CG	ASP	67	-5.400 -12.074 -13.604 1.	230 .00 0.00	
ATOM	578	OD1		67		.00 0.00	
ATOM	579		ASP	67		.00 0.00	
ATOM	580	C	ASP	67			
ATOM	581		ASP -			.00 0.00	
						.00 0.00	
ATOM	582		ASP	67		.00 0.00	
ATOM	583	05'	GUA	68		.00 0.00	
ATOM	584	C5'	GUA	68		.00 0.00	
ATOM	585	C4'	GUA	68		.00 0.00	
ATOM	586	04'	GUA	68		.00 0.00	
MOTA	587	C1'	GUA	68		.00 0.00	
ATOM	588	N9	GUA	68		.00 0.00	
ATOM	589	C8	GUA	68		.00 0.00	
ATOM	590	N7	GUA	68		.00 0.00	
ATOM	591	C5	GUA	68		.00 0.00	
ATOM	592	C6	GUA	68		.00 0.00	
ATOM Atom	593	06	GUA	68		.00 0.00	
	594	N1	GUA	68		.00 0.00	
ATOM	595	C2	GUA	68 69		.00 0.00	
ATOM	596	N2	GUA	68		.00 0.00	
ATOM Atom	597 598	N3 C4	GUA GUA	68 68		.00 0.00	
ATOM	599	C3'	GUA	68			
ATOM	600	C2'	GUA	68		.00 0.00	
ATOM	601	03'	GUA	68		.00 0.00	
ATOM	602	P	THY	69		.00 0.00	
ATOM	603		THY	69		.00 0.00	
ATOM	604		THY	69		.00 0.00	
ATOM	605	05'	THY	69		.00 0.00	
ATOM	606	C5'	THY	69		.00 0.00	
ATOM	607	C4'	THY	69		.00 0.00	
ATOM	608	04'	THY	69		.00 0.00	
ATOM	609	C1'		69		.00 0.00	
ATOM	610	N1	THY	69		.00 0.00	
ATOM	611	C6	THY	69		.00 0.00	
ATOM	612	C5	THY	69		.00 0.00	
ATOM	613	C7	THY	69		.00 0.00	
ATOM	614	C4	THY	69		.00 0.00	
ATOM	615	04	THY	69		.00 0.00	
ATOM	616	N3	THY	69		.00 0.00	
ATOM	617	C2	THY	69	-10.503 -34.150 5.133 1	.00 0.00	
ATOM	618	02	THY	69	-10.690 -34.019 3.926 1	.00 0.00	
ATOM	619	C3'	THY	69	-6.195 -35.967 4.198 1	.00 0.00	
ATOM	620	C2'	THY	69	-7.079 -34.860 4.787 1	.00 0.00	
ATOM	621	03'	THY	69	-6.047 -35.859 2.794 1	.00 0.00	
ATOM	622	P	THY	70	-5.118 -34.713 2.146 1	.00 0.00	
ATOM	623		THY	70		.00 0.00	
ATOM	624		THY	70	·	.00 0.00	
ATOM	625	05'	THY	70		.00 0.00	
ATOM	626	C5'	THY	70	-7.089 -33.933 0.545 1	.00 0.00	

```
231
                                                                   232
        627 C4' THY
                         70
                                 -8.180 -32.855
                                                   0.521 1.00 0.00
ATOM
ATOM
        628
             04'
                 THY
                         70
                                 -8.747 -32.732
                                                   1.808
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        629
             C1'
                 THY
                         70
                                 -9.329 -31.455
                                                   1.921
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N1
                  THY
                                  -9.571 -31.136
                                                   3.353
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        630
                         70
             60
                  THY
                         70
                                 -8.595 -31.378
                                                   4.291
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        631
ATOM
             C5
                  THY
                         70
                                 -8.827 -31.179
                                                   5.611
                                                          1.00
                                                                 0.00
        632
ATOM
        633
             C7
                  THY
                         70
                                  -7.668 -31.480
                                                   6.541
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        634
             C4
                  THY
                         70
                                -10.111 -30.715
                                                   6.096
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        635
             04
                  THY
                         70
                                -10.405 -30.511
                                                   7.271
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             N3
                  THY
                         70
                                -11.047 -30.518
                                                   5.097
                                                          1.00
                                                                 0.00
        636
ATOM
        637
             C2
                  THY
                                -10.829 -30.667
                                                   3.736
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         70
ATOM
        638
              02
                  THY
                         70
                                -11.707 -30.362
                                                   2.933
                                                          1.00
                                                                 0.00
              C3'
ATOM
        639
                 THY
                         70
                                  -7.679 -31.443
                                                   0.170
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        640
              C2' THY
                         70
                                  -8.282 -30.553
                                                   1.270
                                                          1.00
                                                                 0.00
              03' THY
ATOM
        641
                         70
                                  -8.118 -31.109
                                                  -1.138
                                                           1.00
                                                                 0.00
             P
ATOM
         642
                  ADE
                         71
                                  -7.669 - 29.757
                                                  -1.895
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OP1 ADE
                                  -6.293 -29.389
ATOM
         643
                         71
                                                  -1.481
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OP2 ADE
                                  -7.977 -29.884
                                                   -3.333
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         644
              05' ADE
ATOM
                                  -8.642 -28.635
                                                  -1.289
                                                           1.00
         645
                                                                 0.00
ATOM
         646
              C5'
                  ADE
                                 -10.016 -28.583
                                                  -1.618
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         71
ATOM
         647
              C4'
                  ADE
                                 -10.721 -27.526
                                                   -0.760
                                                           1.00
                         71
                                                                 0.00
              04'
                  ADE
ATOM
         648
                         71
                                 -10.931 -28.001
                                                    0.570
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         649
              C1'
                  ADE
                         71
                                 -10.684 -26.928
                                                    1.453
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         650
              N9
                  ADE
                                 -10.445 -27.321
                                                    2.860
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         71
ATOM
              68
                  ADE
                                  -9.294 -27.826
                                                          1.00
         651
                         71
                                                    3.402
                                                                 0.00
ATOM
         652
              N7
                  ADE
                                  -9.274 -27.888
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         71
                                                    4.701
ATOM
         653
              C5
                  ADE
                                 -10.516 -27.380
                                                    5.052
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         71
ATOM
         654
              60
                  ADE
                         71
                                 -11.121 -27.138
                                                    6.296
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         655
              N6
                  ADE
                         71
                                 -10.502 -27.417
                                                   7.445
                                                           1.00
                                                                 0.00
              N1
                  ADE
                                 -12.343 -26.576
ATOM
         656
                         71
                                                    6.324 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         657
              C2
                 ADE
                         71
                                 -12.941 -26.284
                                                    5.172
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         658
              N3
                  ADE
                                 -12.489 -26.479
                                                    3.935
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         71
ATOM
         659
              C4
                  ADE
                         71
                                 -11.247 -27.036
                                                    3.942
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C3'
                  ADE
                                  -9.880 -26.242
ATOM
         660
                         71
                                                   -0.619
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C2' ADE
ATOM
         661
                          71
                                  -9.399 -26.409
                                                    0.819
                                                          1.00
                                                                 0.00
              03' ADE
                                 -10.719 -25.122
ATOM
         662
                         71
                                                   -0.766
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  GUA
ATOM
         663
              P
                          72
                                 -10.165 -23.615
                                                   -0.877
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OP1 GUA
                                  -9.033 -23.436
ATOM
         664
                                                    0.064
                                                           1.00
                          72
                                                                 0.00
ATOM
         665
              OP2 GUA
                          72
                                 -10.004 -23.267
                                                   -2.305
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         666
              05' GUA
                          72
                                 -11.425 -22.835
                                                   -0.267
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  GUA
                                 -12.737 -23.005
ATOM
         667
              C5'
                         72
                                                   -0.771
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         668
              C4'
                  GUA
                          72
                                 -13.753 -22.519
                                                    0.269
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         669
              04'
                  GUA
                          72
                                 -13.632 -23.271
                                                           1.00
                                                    1.473
                                                                 0.00
ATOM
         670
              C1'
                  GUA
                          72
                                 -13.317 -22.434
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                                    2.575
ATOM
         671
              N9
                  GUA
                          72
                                 -12.309 -23.088
                                                    3.444
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         672
              68
                  GUA
                          72
                                 -11.142 -23.683
                                                    3.048
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                 -10.344 -24.025
              N7
                  GUA
ATOM
         673
                          72
                                                    4.020
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         674
              C5
                  GUA
                          72
                                 -11.062 -23.684
                                                    5.158
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         675
              6
                  GUA
                          72
                                 -10.726 -23.866
                                                    6.531
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         676
              06
                  GUA
                          72 .
                                  -9.681 -24.316
                                                    6.994 1.00 0.00
```

					(118)			特開200
	233							234
ATOM	677	N1	GUA	72	-11.749 -23.473	7.386	1.00	0.00
ATOM	678	C2	GUA	72	-12.952 -22.939	6.968	1.00	0.00
ATOM	679	N2	GUA	72	-13.813 -22.545	7.909	1.00	0.00
ATOM	680	N3	GUA	72	-13.259 -22.743	5.676	1.00	0.00
ATOM	681	C4	GUA	72	-12.281 -23.141	4.820	1.00	0.00
ATOM	682	C3 <b>'</b>	GUA	72	-13.520 -21.056	0.644	1.00	0.00
ATOM	683	C2'	GUA	72	-12.700 -21.202	1.923	1.00	0.00
ATOM	684	03'	GUA	72	-14.779 -20.436	0.844	1.00	0.00
ATOM	685	P	GUA	73	-14.928 -18.846	1.070	1.00	0.00
ATOM	686	0P1	GUA	73	-16.316 -18.460	0.731	1.00	0.00
ATOM	687	0P2	GUA	73	-13.792 -18.163	0.411	1.00	0.00
ATOM	688	05'	GUA	73	-14.743 -18.718	2.661	1.00	0.00
ATOM	689	C5'	GUA	73	-15.725 -19.221	3.544	1.00	0.00
ATOM	690	C4'	GUA	73	-15.243 -19.121	4.990	1.00	0.00
ATOM	691	04'	GUA	73	-14.069 -19.890	5.184	1.00	0.00
ATOM	692	C1'	GUA	73	-13.281 -19.237	6.152	1.00	0.00
ATOM	693	N9	GUA	73	-11.891 -19.745	6.156	1.00	0.00
ATOM	694	С8	GUA	73	-11.029 -19.901	5.102	1.00	0.00
ATOM	695	N7	GUA	73	-9.887 -20.448	5.416	1.00	0.00
ATOM	696	C5	GUA	73	-9.988 -20.650	6.789	1.00	0.00
ATOM	697	C6	GUA	73	-9.061 -21.230	7.703	1.00	0.00
ATOM	698	06	GUA	73	-7.942 -21.676	7.454	1.00	0.00
ATOM	699	N1	GUA	73	-9.559 -21.280	9.004	1.00	0.00
ATOM	700	C2	GUA	73	-10.807 -20.823	9.380	1.00	0.00
ATOM	701	N2	GUA	73	-11.153 -20.894	10.665	1.00	0.00
ATOM	702	N3	GUA	73	-11.674 -20.272	8.523	1.00	0.00
ATOM	703	C4	GUA	73	-11.208 -20.216	7.249	1.00	0.00
ATOM	704	C3'	GUA	73	-14.878 -17.689	5.422	1.00	0.00
ATOM	705	C2'	GUA	73	-13.367 -17.806	5.645	1.00	0.00
ATOM	706	03'	GUA	73	-15.595 -17.413	6.611	1.00	0.00
ATOM	707	P	GUA	74	-15.547 -15.988	7.363	1.00	0.00
ATOM	708	0P1	GUA	74	-16.938 -15.530	7.577	1.00	0.00
ATOM	709	0P2	GUA	74	-14.577 -15.104	6.678	1.00	0.00
ATOM	710	05'	GUA	74	-14.926 -16.411	8.785	1.00	0.00
ATOM	711	C5'	GUA	74	-15.630 -17.272	9.661	1.00	0.00
ATOM	712	C4'	GUA	74	-14.849 -17.486	10.961	1.00	0.00
ATOM	713	04'	GUA	74	-13.579 -18.046	10.663	1.00	0.00
ATOM	714	C1'	GUA	74	-12.550 -17.269	11.239	1.00	0.00
ATOM	715	N9	GUA	74	-11.349 -17.330	10.372	1.00	0.00
ATOM	716	C8	GUA	74	-11.239 -16.978	9.050	1.00	0.00
ATOM	717	N7	GUA	74	-10.083 -17.256	8.514	1.00	0.00
ATOM	718	C5	GUA	74	-9.371 -17.843	9.552	1.00	
ATOM	719	C6	GUA	74	-8.063 -18.411	9.558	1.00	
ATOM	720	06	GUA		-7.281 -18.512	8.617	1.00	
ATOM	721	N1	GUA		-7.704 -18.911	10.805	1.00	
ATOM	722	C2	GUA		-8.524 -18.897	11.916	1.00	
ATOM	723	N2	GUA		-8.035 -19.375	13.062	1.00	
ATOM	724	N3	GUA		-9.763 -18.387	11.904	1.00	
ATOM	725	C4	GUA		-10.130 -17.878	10.698	1.00	
ATOM	726	C3'	GUA	74	-14.588 -16.172	11.715	1.00	0.00

```
235
                                                                   236
ATOM
        727
             C2'
                 GUA
                         74
                                -13.150 -15.866 11.302 1.00 0.00
             03'
                 GUA
                                                                0.00
ATOM
        728
                         74
                                -14.739 -16.398
                                                 13.106
                                                          1.00
ATOM
        729
             P
                 THY
                         75
                                -14.584 -15.221
                                                  14.203
                                                          1.00
                                                                0.00
             OP1 THY
ATOM
        730
                         75
                                -14.691 -13.912
                                                  13.522
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        731
             OP2 THY
                         75
                                -15.470 -15.531
                                                  15.347
                                                          1.00
                                                                 0.00
             05' THY
ATOM
        732
                         75
                                -13.060 -15.416
                                                  14.680
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C5'
                 THY
                                -12.677 -16.561
ATOM
        733
                         75
                                                  15.416
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C4'
                 THY
ATOM
        734
                         75
                                -11.156 -16.627
                                                  15.527
                                                          1.00
                                                                 0.00
        735
             04'
                 THY
                                -10.574 -16.549
                                                  14.241
ATOM
                         75
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C1'
                 THY
                         75
                                 -9.289 -15.991
                                                  14.379
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        736
ATOM
        737
             N1
                 THY
                                 -8.778 -15.533
                                                  13.059
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         75
                 THY
        738
             C6
                         75
                                 -9.575 -14.800
                                                  12.206
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
        739
             C5
                 THY
                         75
                                 -9.163 -14.489
                                                  10.948
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C7
                 THY
                         75
                                 -10.128 -13.667
ATOM
        740
                                                  10.116
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        741
             C4
                  THY
                         75
                                  -7.874 -14.921
                                                  10.446
                                                          1.00
                                                                 0.00
             04
                  THY
                         75
                                                                 0.00
ATOM
        742
                                 -7.428 - 14.763
                                                   9.310
                                                          1.00
              N3
                  THY
                                  -7.117 -15.582
                                                 11.389
ATOM
        743
                         75
                                                          1.00
                                                                 0.00
              C2
                 THY
                         75
                                 -7.501 -15.928
                                                                 0.00
ATOM
        744
                                                  12.671
                                                          1.00
ATOM
              02
                  THY
                                  -6.730 -16.553
                                                  13.392
                                                          1.00
                                                                 0.00
         745
                         75
              C3'
                  THY
ATOM
         746
                         75
                                 -10.528 -15.482
                                                  16.340
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         747
             C2'
                  THY
                         75
                                  -9.574 -14.836
                                                  15.331
                                                          1.00
                                                                 0.00
              03'
                 THY
                         75
                                  -9.881 -16.050
                                                                 0.00
ATOM
         748
                                                  17.467
                                                          1.00
ATOM
         749
              P
                  THY
                                  -9.099 -15.169
                                                  18.570
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         76
              OP1 THY
ATOM
         750
                         76
                                  -9.173 -15.877
                                                  19.867
                                                          1.00
                                                                 0.00
              OP2 THY
                                  -9.545 -13.762
                                                  18.466
ATOM
         751
                         76
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         752
             05' THY
                         76
                                  -7.586 -15.260
                                                  18.036
                                                                 0.00
                                                          1.00
ATOM
         753
             C5' THY
                                  -6.901 -16.498
                                                  18.020
                                                                 0.00
                         76
                                                          1.00
ATOM
         754
             C4'
                  THY
                         76
                                  -5.538 -16.333
                                                  17.349
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         755 - 04'
                  THY
                         76
                                  -5.697 -15.832
                                                  16.041
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                  -4.527 -15.136
ATOM
         756
             C1' THY
                                                  15.683
                         76
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                  14.499
ATOM
         757
              N1
                  THY
                         76
                                  -4.805 -14.276
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         758
              60
                  THY
                         76
                                  -5.955 -13.517
                                                  14.447
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         759
              C5
                  THY
                         76
                                  -6.306 - 12.849
                                                  13.318
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
              C7
                                  -7.590 -12.044
                                                  13.388
ATOM
         760
                         76
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         761
              C4
                  THY
                         76
                                  -5.497 -12.911
                                                  12.117
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
         762
              04
                         76
                                  -5.756 -12.384
                                                  11.038
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                  -4.350 -13.669
              N3
                  THY
ATOM
         763
                         76
                                                  12.261
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C2
                  THY
                                 -3.950 -14.350
                                                  13.398
ATOM
         764
                         76
                                                           1.00
                                                                 0.00
         765
              02
                  THY
                         76
                                  -2.888 -14.978 13.396
                                                                 0.00
ATOM
                                                          1.00
              C3'
                  THY
                                  -4.618 -15.335
ATOM
         766
                         76
                                                  18.067
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C2'
                  THY
                                                  16.957
                                                                 0.00
         767
                         76
                                  -4.248 -14.341
                                                           1.00
ATOM
         768
              03'
                  THY
                         76
                                  -3.516 -16.063
                                                  18.579
                                                           1.00
                                                                 0.00
              P
                  ADE
ATOM
         769
                         77
                                  -2.384 - 15.400
                                                  19.513
                                                          1.00
                                                                 0.00
              OP1 ADE
                         77
                                  -1.832 -16.484
                                                                 0.00
ATOM
         770
                                                  20.358
                                                           1.00
ATOM
              OP2 ADE
                         77
                                  -2.915 -14.170
                                                   20.135
                                                                 0.00
         771
                                                           1.00
ATOM
         772
              05' ADE
                         77
                                  -1.269 -14.999
                                                  18.430
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         773
              C5' ADE
                         77
                                  -0.525 -15.999
                                                   17.766
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C4' ADE
ATOM
         774
                          77
                                   0.339 - 15.378
                                                  16.672
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              04' ADE
         775
                          77
                                  -0.467 - 14.736
                                                  15.705
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C1' ADE
ATOM
         776
                          77
                                   0.267 -13.661 15.163 1.00 0.00
```

	237				()				238
ATOM	777	N9	ADE	77	-0.662	-12.755	14.454	1.00	0.00
ATOM	778	C8	ADE	77		-12.145	14.943	1.00	0.00
ATOM	779	N7	ADE	77		-11.492	14.049	1.00	0.00
ATOM	780	C5	ADE	77		-11.676	12.882	1.00	0.00
ATOM	781	C6	ADE	77					
						-11.242	11.557	1.00	0.00
ATOM	782	N6	ADE	77 77		-10.493	11.205	1.00	0.00
ATOM	783	N1	ADE	77		-11.592	10.622	1.00	0.00
ATOM	784	C2	ADE	77		-12.350	10.986	1.00	0.00
ATOM	785	N3.	ADE	77		-12.855	12.187	1.00	0.00
ATOM	786	C4	ADE	77		-12.454	13.112	1.00	0.00
ATOM	787	C3'	ADE	77		-14.309	17.185	1.00	0.00
ATOM	788	C2'	ADE	77		-13.056	16.414	1.00	0.00
ATOM	789	03'	ADE	77		-14.762	16.882	1.00	0.00
ATOM	790	P	GUA	78		-14.004	17.398	1.00	0.00
ATOM	791		GUA	78		-13.001	18.414	1.00	0.00
ATOM	792		GUA	78		-15.035	17.714	1.00	0.00
ATOM	793	05'	GUA	78		-13.233	16.060	1.00	0.00
ATOM	794	C5'	GUA	78		-13.946	14.979	1.00	0.00
ATOM	795	C4'	GUA	78		-13.096	13.709	1.00	0.00
ATOM	796	04'	GUA	78		-12.584	13.409	1.00	0.00
ATOM	797	C1'	GUA	78		-11.359		1.00	0.00
ATOM	798	N9	GUA	78		-10.557	12.737	1.00	0.00
ATOM	799	С8	GUA	78		-10.257	13.809	1.00	0.00
ATOM	800	N7	GUA	78	0.777	-9.536	13.509	1.00	0.00
ATOM	801	C5	GUA	78	0.897	-9.328	12.138	1.00	0.00
ATOM	802	C6	GUA	78	0.045	-8.623	11.235	1.00	0.00
ATOM	803	06	GUA	78	-0.995	-8.019	11.490	1.00	0.00
ATOM	804	N1	GUA	78	0.495	-8.678	9.919	1.00	0.00
ATOM	805	C2	GUA	78	1.641	-9.331	9.517	1.00	0.00
ATOM	806	N2	GUA	78	1.990	-9.229	8.233	1.00	0.00
ATOM	807	N3	GUA	78	2.444	-9.996	10.362	1.00	0.00
ATOM	808	C4	GUA	78	2.022	-9.957	11.654	1.00	0.00
ATOM	809	C3'	GUA	78	5.912	-11.880	13.816	1.00	0.00
ATOM	810	C2'	GUA	78		-10.714	13.585	1.00	0.00
ATOM	811	03'	GUA	78	6.905	-12.011	12.815	1.00	0.00
ATOM	812	P	GUA	79		-10.933	12.606	1.00	0.00
ATOM	813		GUA	79		-10.032	13.779	1.00	0.00
ATOM	814		GUA	79	9.307	-11.662	12.193	1.00	0.00
ATOM	815	05'	GUA	79		-10.102	11.342	1.00	0.00
ATOM	816	C5'	GUA	79	7.436	-10.710	10.069	1.00	0.00
ATOM	817	C4'	GUA	79	6.927	-9.708	9.029	1.00	0.00
ATOM	818	04'	GUA	79	5.638	-9.247	9.396	1.00	0.00
ATOM	819	C1'	GUA	79	5.562	-7.855	9.182	1.00	0.00
ATOM	820	N9	GUA	79	4.501	-7.277	10.036	1.00	0.00
ATOM	821	C8	GUA	79	4.352	-7.378	11.396	1.00	0.00
ATOM	822	N7	GUA	79	3.259	-6.842	11.860	1.00	0.00
ATOM	823	C5	GUA		2.637	-6.333	10.726	1.00	0.00
ATOM	824	C6	GUA		1.395	-5.641	10.594	1.00	0.00
ATOM	825	06	GUA		0.599		11.481	1.00	0.00
ATOM	826	N1	GUA	79	1.120	-5.293	9.276	1.00	0.00

239 8.204 1.00 0.00 ATOM 827 C2 GUA 79 1.942 - 5.577N2 GUA 79 -5.1327.000 1.00 ATOM 828 1.577 -6.235 ATOM 829 N3 **GUA** 79 3.102 8.325 1.00 C4 GUA 79 3.393 -6.586 9.606 1.00 ATOM 830 **ATOM** 831 C3' GUA 79 7.821 -8.4638.918 1.00 C2' GUA 79 6.958 -7.3979.592 1.00 ATOM 832 03' GUA 8.070 -8.200 1.00 ATOM 833 79 7.546 834 P GUA 9.033 -7.001 7.053 1.00 ATOM 80 835 0P1 GUA 9.864 -6.5541.00 ATOM 80 8.192 OP2 GUA 9.678 -7.414 1.00 ATOM 836 80 5.787 05' GUA 7.975 - 5.8361.00 ATOM 837 80 6.720 C5' GUA 7.124 -5.929 5.594 1.00 ATOM 838 80 C4' GUA 6.175 -4.7295.550 1.00 ATOM 839 80 04' GUA 5.357 -4.723 1.00 ATOM 840 80 6.705 C1' GUA -3.3857.094 ATOM 841 80 5.153 **GUA** 4.682 -3.318 N9 8.493 1.00 ATOM 842 80 **GUA** -3.821ATOM 843 68 80 5.280 9.619 N7 GUA 4.595 -3.644 844 80 10.713 ATOM ATOM **GUA** 3.452 -2.977 10.286 845 C5 80 ATOM 846 60 **GUA** 80 2.314 -2.536 11.025 ATOM 847 06 GUA 2.096 -2.65612.229 80 1.372 -1.909 10.219 ATOM 848 N1 GUA 80 ATOM 849 C2**GUA** 80 1.503 -1.7198.859 ATOM N2GUA 0.532 - 1.0548.228 850 80 N3 GUA 2.566 -2.1428.160 ATOM 851 80 ATOM 852 **C4** GUA 80 3.500 -2.7668.929 1.00 ATOM 853 C3, GUA 80 6.910 -3.3785.549 ATOM 854 C2' GUA 6.553 -2.804 6.918 80 ATOM 855 03' GUA 80 6.399 -2.5364.537 05' CYT -6.307ATOM 856 81 3.065 13.425 ATOM 857 C5' CYT 81 -5.846 3.764 12.286 **ATOM** 858 C4' CYT -5.0082.861 11.375 81 ATOM 859 04' CYT 81 -3.9372.263 12.077 C1' CYT **ATOM** 860 81 -3.4591.220 11.257 ATOM 861 N1 CYT 81 -2.6040.259 11.996 -2.971ATOM 862 6 CYT 81 -0.17313.245 C5 CYT 13.902 ATOM 863 81 -2.266-1.121ATOM C4 CYT -1.103-1.64213.240 864 81 865 N4 CYT 81 -0.334-2.55813.832 1.00 ATOM N3CYT -0.774-1.24312.006 ATOM 866 81 C2CYT -0.311ATOM 867 81 -1.51111.346 ATOM 02 CYT -1.210 -0.001 10.195 868 81 C3' CYT ATOM 869 81 -5.7741.673 10.774 1.00 C2' CYT -4.750ATOM 870 81 0.539 10.834 1.00 0.00 03' CYT -6.192 1.983 1.00 0.00 ATOM 871 81 9.454 ATOM 872 P CYT 82 -7.0070.933 8.531 1.00 0.00 **ATOM** 873 OP1 CYT 82 -7.632 -0.0719.420 1.00 0.00 OP2 CYT ATOM 874 82 -7.8451.709 7.591 1.00 0.00

-5.845

-5.090

0.196

0.892

7.685

1.00

6.709 1.00 0.00

0.00

05' CYT

C5' CYT

82

82

875

876

ATOM

ATOM

					(122)				171H1 C O
	241								242
ATOM	877	C4'	CYT	82	-4.054	-0.028	6.048	1.00	0.00
ATOM	878	04'	CYT	82	-3.163	-0.542	7.020	1.00	0.00
ATOM	879	C1'	CYT	82	-2.921	-1.915	6.790	1.00	0.00
ATOM	880	N1	CYT	82	-2.690	-2.567	8.098	1.00	0.00
ATOM	881	C6	CYT	82	-3.600	-2.365	9.097	1.00	0.00
ATOM	882	C5	CYT	82	-3.467	-2.924	10.311	1.00	0.00
ATOM	883	C4	CYT	82	-2.310	-3.747	10.518	1.00	0.00
ATOM	884	N4	CYT	82	-2.112	-4.350	11.691	1.00	0.00
ATOM	885	N3	CYT	82	-1.429	-3.965	9.529	1.00	0.00
ATOM	886	C2	CYT	82	-1.596	-3.401	8.300	1.00	0.00
ATOM	887	02	CYT	82	-0.795	-3.645	7.400	1.00	0.00
ATOM	888	C3'	CYT	82	-4.675	-1.244	5.343	1.00	0.00
ATOM	889	C2'	CYT	82	-4.238	-2.417	6.207	1.00	0.00
ATOM	890	03'	CYT	82	-4.171	-1.299	4.018	1.00	0.00
ATOM	891	P	CYT	83	-4.589	-2.450	2.967	1.00	0.00
ATOM	892		CYT	83	-5.868	-3.047	3.407	1.00	0.00
ATOM	893		CYT	83	-4.466	-1.892	1.601	1.00	0.00
ATOM	894	05'	CYT	83	-3.426	-3.549	3.172	1.00	0.00
ATOM	895	C5'	CYT	83	-2.106	-3.323	2.707	1.00	0.00
ATOM	896	C4'	CYT	83	-1.228	-4.547	2.993	1.00	0.00
ATOM	897	04'	CYT	83	-1.177	-4.793	4.382	1.00	0.00
ATOM	898	C1'	CYT	83	-1.037	-6.177	4.623	1.00	0.00
ATOM	899	N1	CYT	83					
	900		CYT	83	-1.611	-6.472	5.962	1.00	0.00
ATOM		C6			-2.820	-5.921	6.297	1.00	0.00
ATOM	901	C5	CYT	83	-3.352	-6.058	7.528	1.00	0.00
ATOM	902	C4	CYT	83	-2.590	-6.818	8.478	1.00	0.00
ATOM	903	N4	CYT	83	-3.044	-6.982	9.721	1.00	0.00
ATOM	904	N3	CYT	83	-1.424	-7.390	8.141	1.00	0.00
ATOM	905	C2	CYT	83	-0.908	-7.247	6.885	1.00	0.00
ATOM	906	02	CYT	83	0.147	-7.805	6.592	1.00	0.00
ATOM	907	C3'	CYT	83	-1.767	-5.832	2.343	1.00	0.00
ATOM	908	C2'	CYT	83	-1.890	-6.802	3.521	1.00	0.00
ATOM	909	03'	CYT	83	-0.860	-6.251	1.336	1.00	0.00
ATOM	910	P	THY	84	-1.108	-7.560	0.420	1.00	0.00
ATOM	911		THY	84	-0.317	-7.421	-0.821	1.00	0.00
ATOM	912		THY	84	-2.559	-7.832	0.345	1.00	0.00
ATOM	913	05'		84	-0.436	-8.717	1.305	1.00	0.00
ATOM	914	C5'	THY	84	0.946	-8.702	1.602	1.00	0.00
ATOM	915	C4'	THY	84	1.243	-9.777	2.645	1.00	0.00
ATOM	916	04'	THY	84	0.503	-9.541	3.828	1.00	0.00
ATOM	917	C1'	THY	84		-10.765	4.515	1.00	0.00
ATOM	918	N1	THY	84		-10.673	5.541	1.00	0.00
ATOM	919	C6	THY	84		-10.150	5.202	1.00	0.00
ATOM	920	C5	THY	84	-2.902	-9.983	6.127	1.00	0.00
ATOM	921	C7	THY	84	-4.210	-9.408	5.614	1.00	0.00
ATOM	922	C4	THY	84		-10.333	7.517	1.00	0.00
ATOM	923	04	THY	84		-10.183	8.414	1.00	0.00
ATOM	924	N3	THY	84	-1.452	-10.876	7.784	1.00	0.00
ATOM	925	C2	THY	84		-11.083	6.854	1.00	0.00
ATOM	926	02	THY	84	0.607	-11.621	7.197	1.00	0.00

243 244 ATOM 927 C3' THY 84 0.833 - 11.1822.176 1.00 0.00 ATOM 928 C2' THY 84 0.009 - 11.7023.363 1.00 0.00 ATOM 929 03' THY 2.002 -11.925 1.875 1.00 0.00 84 930 P ADE 1.963 -13.467 1.403 1.00 0.00 ATOM 85 ATOM 931 OP1 ADE 85 0.662 - 13.7260.737 1.00 0.00 **ATOM** 932 OP2 ADE 85 3.227 -13.784 0.703 1.00 0.00 05' ATOM 933 ADE 85 1.974 -14.220 2.823 1.00 0.00 ATOM 934 C5' ADE 85 3.011 -13.983 3.760 1.00 0.00 C4' ADE ATOM 935 85 2.615 -14.532 5.129 1.00 0.00 04' ADE 1.00 0.00 ATOM 936 85 1.409 -13.943 5.579 C1' ADE 0.732 - 14.8831.00 0.00 ATOM 937 85 6.382 N9 ADE -0.687 -14.507 1.00 0.00ATOM 938 85 6.553 939 С8 ADE 85 -1.592 -14.102 5.603 1.00 0.00 ATOM ADE -2.738 -13.702 1.00 0.00 ATOM 940 N7 85 6.084 ATOM C5 ADE 85 -2.599 -13.904 7.452 1.00 0.00 941 C6 ADE 1.00 0.00 **ATOM** 942 85 -3.454 - 13.6838.551 ADE 1.00 ATOM 943 N6 85 -4.670 -13.143 8.443 0.00 -3.026 -14.047 944 N1 ADE 85 9.770 1.00 0.00 ATOM ATOM C2ADE -1.822 -14.589 9.898 1.00 0.00 945 85 ATOM 946 N3ADE 85 -0.907 -14.810 8.965 1.00 0.00 **ATOM** 947 C4 ADE -1.368 -14.441 7.742 1.00 0.00 85 C3' ADE 2.351 -16.042 5.113 1.00 0.00 ATOM 948 85 ATOM 949 C2' ADE 0.877 -16.130 5.527 1.00 0.00 85 03' ADE ATOM 950 85 3.248 -16.650 6.023 1.00 0.00 P ADE 3.241 -18.229 ATOM 951 86 6.324 1.00 0.00 ATOM 952 OP1 ADE 86 4.632 -18.651 6.602 1.00 0.00 ATOM 953 OP2 ADE 86 2.474 - 18.9005.247 1.00 0.00 **ATOM** 954 05' ADE 86 2.411 -18.303 7.695 1.00 0.00 **ATOM** 955 C5' ADE 86 2.864 -17:604 8.838 1.00 0.00 ATOM 956 C4' ADE 86 2.238 - 18.13310.130 1.00 0.00 ATOM 957 04' ADE 86 0.904 - 17.68010.241 1.00 0.00 C1' ADE ATOM 958 86 0.002 - 18.76710.246 1.00 0.00 ATOM 959 N9 ADE 86 -1.189 -18.371 9.464 1.00 0.00 ADE ATOM 68 -1.323 -18.2138.104 1.00 0.00 960 86 ADE -2.446 -17.662 ATOM 961 N7 86 7.733 1.00 0.00 ATOM C5 ADE -3.117 -17.457 8.932 1.00 0.00 962 86 ADE ATOM 963 6 86 -4.370 -16.897 9.247 1.00 0.00 ATOM 964 ADE -5.203 -16.389 8.335 N6 86 1.00 0.00 ATOM 965 N1 ADE 86 -4.721 -16.82910.540 1.00 0.00 ATOM 966 C2 ADE 86 -3.899 -17.286 11.473 1.00 0.00 ADE ATOM 967 N3 86 -2.691 -17.812 11.314 1.00 0.00 **ATOM** 968 C4 ADE 86 -2.357 -17.881 9.993 1.00 0.00 C3' ADE ATOM 969 86 2.177 -19.662 10.226 1.00 0.00 C2' ADE ATOM 970 86 0.780 - 19.9509.675 1.00 0.00 ATOM 971 03' ADE 2.329 -20.022 11.589 1.00 0.00 86 2.429 -21.557 P CYT 12.065 ATOM 972 87 1.00 0.00 OP1 CYT ATOM 2.582 -22.415 10.870 0.00 973 87 1.00 974 OP2 CYT 87 3.414 -21.642 13.162 0.00 ATOM 1.00 ATOM 975 05' CYT 87 0.967 -21.785 12.696 1.00 0.00 ATOM 976 C5' CYT 87 0.674 -21.298 13.992 1.00 0.00

	245				(101)			040
4 TOH	245	0.47	OUT	07	0.004 01.000	1.4.000		246
ATOM	977	C4'		87	-0.834 -21.263	14.238	1.00	0.00
ATOM	978	04'	CYT	87	-1.495 -20.690	13.130	1.00	0.00
ATOM	979	C1'	CYT	87	-2.813 -21.183	13.098	1.00	0.00
ATOM	980	N1	CYT	87	-3.390 -20.993	11.743	1.00	0.00
ATOM	981	C6	CYT	87	-2.650 -21.291	10.624	1.00	0.00
ATOM	982	C5	CYT	87 .	-3.120 -21.046	9.382	1.00	0.00
ATOM	983	C4	CYT	87	-4.422 -20.453	9.280	1.00	0.00
ATOM	984	N4	CYT	87	-4.899 -20.078	8.096	1.00	0.00
ATOM	985	N3	CYT	87	-5.149 -20.188	10.373	1.00	0.00
ATOM	986	C2	CYT	87	-4.672 -20.460	11.619	1.00	0.00
ATOM	987	02	CYT	87	-5.370 -20.219	12.600	1.00	0.00
ATOM	988	C3'	CYT	87	-1.478 -22.641	14.449	1.00	0.00
ATOM	989	C2 <b>'</b>	CYT	87	-2.601 -22.657	13.412	1.00	0.00
ATOM	990	03'	CYT	87	-1.934 -22.698	15.791	1.00	0.00
ATOM	991	P	CYT	88	-2.622 -24.012	16.422	1.00	0.00
ATOM	992	0P1	CYT	88	-2.429 -23.964	17.889	1.00	0.00
ATOM	993	0P2	CYT	88	-2.174 -25.194	15.653	1.00	0.00
ATOM	994	05'	CYT	88	-4.182 -23.759	16.113	1.00	0.00
ATOM	995	C5'	CYT	88	-4.901 -22.731	16.769	1.00	0.00
ATOM	996	C4'	CYT	88	-6.285 -22.570	16.137	1.00	0.00
ATOM	997	04'	CYT	88	-6.152 -22.324	14.755	1.00	0.00
ATOM	998	C1'	CYT	88	-7.320 -22.765	14.100	1.00	0.00
ATOM	999	N1	CYT	88	-6.998 -23.030	12.679	1.00	0.00
ATOM	1000-	C6	CYT	88 ´	-5.847 -23.699	12.360	1.00	0.00
ATOM	1001	C5	CYT	88	-5.416 -23.812	11.089	1.00	0.00
ATOM	1002	C4	CYT	88	-6.245 -23.218	10.075	1.00	0.00
ATOM	1003	N4	CYT	88	-5.877 -23.236	8.793	1.00	0.00
ATOM	1004	N3	CYT	88	-7.414 -22.639	10.385	1.00	0.00
ATOM	1005	C2	CYT	88	-7.828 -22.541	11.678	1.00	0.00
ATOM	1006	02	CYT	88	-8.919 -22.042	11.936	1.00	0.00
ATOM	1007	C3'	CYT	88	-7.166 -23.823	16.250	1.00	0.00
ATOM	1008	C2'	CYT	88	-7.637 -24.070	14.817	1.00	0.00
ATOM	1009	03'	CYT	88	-8.222 -23.545	17.156	1.00	0.00
ATOM	1010	P	CYT	89	-9.413 -24.588	17.469	1.00	0.00
ATOM	1011		CYT	89	-9.915 -24.316	18.833	1.00	0.00
ATOM	1012		CYT	89	-8.953 -25.949	17.110	1.00	0.00
ATOM	1013		CYT	89	-10.553 -24.147	16.414	1.00	0.00
ATOM	1014	C5'		89	-11.205 -22.893	16.514	1.00	0.00
ATOM	1015	C4'	CYT	89	-12.234 -22.731	15.388	1.00	0.00
ATOM	1016	04'	CYT	89	-11.591 -22.820	14.133	1.00	0.00
ATOM	1017	C1'	CYT	89	-12.432 -23.460	13.196	1.00	0.00
ATOM	1018	N1	CYT	89	-11.569 -24.143	12.198	1.00	0.00
ATOM	1019	C6	CYT	89	-10.500 -24.879	12.638	1.00	0.00
ATOM	1020	C5	CYT	89	-9.585 -25.386	11.789	1.00	0.00
ATOM	1021	C4	CYT	89	-9.788 -25.124	10.393	1.00	0.00
ATOM	1022	N4	CYT	89	-8.903 -25.557	9.494	1.00	0.00
ATOM	1023	N3	CYT	89	-10.869 -24.461	9.959	1.00	0.00
ATOM	1024	C2	CYT	89	-11.792 -23.969	10.835	1.00	0.00
ATOM	1025	02	CYT	89	-12.794 -23.396	10.409	1.00	0.00
ATOM	1026	C3'	CYT	89	-13.312 -23.825	15.407	1.00	0.00
	2220		- · ·		11.112 20.020	-3.101		

```
247
                                                                   248
       1027 C2' CYT
                                -13.174 -24.488 14.040 1.00 0.00
ATOM
                         89
             03' CYT
                         89
                                -14.581 -23.226
                                                  15.621
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1028
ATOM
       1029
             P
                 THY
                         90
                                -15.957 -24.076
                                                  15.699
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                  16.067
ATOM
       1030 OP1 THY
                         90
                                -15.628 -25.471
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OP2 THY
                                -16.928 -23.310
                                                  16.511
                                                          1.00
ATOM
       1031
                         90
                                                                 0.00
                                                          1.00
             05' THY
                                -16.468 -24.069
ATOM
       1032
                         90
                                                  14.170
                                                                 0.00
ATOM
       1033
             C5'
                 THY
                         90
                                -16.840 -22.865
                                                  13.524
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                  12.032
       1034 C4'
                                -17.076 -23.115
ATOM
                 THY
                         90
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                -15.920 -23.705
ATOM
       1035
             04' THY
                         90
                                                  11.469
                                                          1.00
                                                                0.00
             C1' THY
                                 -16.298 -24.622
                                                  10.468
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1036
                         90
             N1
                  THY
                                 -15.192 -25.600
                                                  10.293
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1037
                         90
ATOM
       1038
              C6
                  THY
                         90
                                 -14.703 -26.277
                                                  11.385
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
                                 -13.597 -27.052
                                                  11.299
                                                           1.00
ATOM
       1039
              C5
                         90
                                                                 0.00
ATOM
        1040
             C7
                  THY
                         90
                                 -13.162 -27.765
                                                  12.566
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
                                 -12.872 -27.192
                                                   10.056
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1041
             C4
                         90
ATOM
        1042
              04
                  THY
                         90
                                 -11.835 -27.832
                                                   9.908
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1043
             N3
                  THY
                         90
                                 -13.442 -26.514
                                                   8.991
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1044
              C2
                  THY
                         90
                                 -14.597 -25.745
                                                   9.039
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1045
              02
                  THY
                         90
                                 -15.054 - 25.249
                                                   8.013
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
        1046
              C3'
                         90
                                 -18.238 -24.079
                                                   11.746
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C2'
                  THY
                                 -17.553 -25.262
                                                                 0.00
ATOM
        1047
                         90
                                                   11.059
                                                           1.00
ATOM
        1048
              03' THY
                          90
                                 -19.183 -23.425
                                                   10.914
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  ADE
                                 -20.615 -24.079
                                                   10.543
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1049
              P
                         91
              OP1 ADE
                                 -21.534 -22.987
                                                                 0.00
ATOM
        1050
                          91
                                                   10.155
                                                           1.00
ATOM
        1051
              OP2 ADE
                          91
                                 -20.998 -25.015
                                                   11.623
                                                           1.00
                                                                 0.00
              05' ADE
        1052
                          91
                                 -20.281 -24.942
                                                   9.227
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C5' ADE
ATOM
        1053
                                 -20.066 -24.316
                                                   7.978
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          91
              C4'
                  ADE
                                 -19.504 -25.318
                                                   6.968
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1054
                          91
        1055
              04' ADE
                                 -18.274 -25.845
                                                           1.00
ATOM
                                                    7.411
                                                                 0.00
                          91
              C1' ADE
                                 -18.032 -27.006
                                                    6.652 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1056
                          91
ATOM
        1057
              N9
                  ADE
                                 -16.990 -27.821
                                                    7.301
                                                          1.00
                                                                 0.00
                          91
ATOM
        1058
              С8
                  ADE
                          91
                                 -16.899 -28.169
                                                    8.622 1.00
                                                                 0.00
 ATOM
        1059
              N7
                  ADE
                          91
                                 -15.812 -28.824
                                                    8.930
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C5
                  ADE
                                 -15.150 -28.938
                                                    7.711 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1060
                          91
        1061
              60
                  ADE
                                 -13.923 - 29.517
                                                    7.332
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
                          91
 ATOM
        1062
              N6
                  ADE
                          91
                                 -13.095 -30.090
                                                    8.207
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
        1063
              N1
                  ADE
                          91
                                 -13.580 -29.506
                                                    6.030
                                                          1.00
                                                                 0.00
        1064
              C2
                  ADE
                                 -14.403 - 28.941
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
                          91
                                                    5.150
              N3
                  ADE
                                                                 0.00
 ATOM
        1065
                          91
                                 -15.559 -28.331
                                                    5.381
                                                          1.00
                  ADE
                                 -15.880 -28.362
                                                    6.703
                                                          1.00
                                                                 0.00
 ATOM
        1066
              C4
                          91
              C3'
 ATOM
        1067
                  ADE
                          91
                                 -20.391 -26.551
                                                    6.728
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C2'
                                 -19.382 -27.705
 ATOM
        1068
                  ADE
                          91
                                                    6.707 1.00
                                                                 0.00
              03' ADE
                          91
                                 -21.100 -26.360
                                                    5.512 1.00
                                                                 0.00
 ATOM
        1069
 ATOM
        1070 P
                  ADE
                          92
                                 -21.995 -27.510
                                                    4.812 1.00
                                                                 0.00
 ATOM
        1071
              OP1 ADE
                          92
                                 -22.403 -28.492
                                                    5.841 1.00
                                                                 0.00
              OP2 ADE
                                 -23.020 -26.851
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
        1072
                          92
                                                    3.973
 ATOM
        1073
              05' ADE
                          92
                                 -20.925 -28.217
                                                    3.835
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
        1074
              C5' ADE
                          92
                                 -20.268 -27.481
                                                    2.819 1.00
                                                                 0.00
 ATOM
        1075
              C4'
                  ADE
                          92
                                 -19.213 -28.346
                                                    2.123 1.00
                                                                 0.00
 ATOM
        1076 04' ADE
                          92
                                 -18.267 -28.817
                                                    3.071 1.00 0.00
```

0

1378

0.03665

3.95953

305

0.15003

0.20357

460

0.03126

273

0.05055

340

0.15003

0.14749

REMARK

REMARK

REMARK

(127)251 252 2 0 0 0 REMARK 3 1 0 -0.891 -14.462 33.780 1.00 0.00 ATOM N GLU 1 1 ATOM 2 CA GLU. 1 -1.085 -15.762 33.117 1.00 0.00CB GLU -2.152 -15.633 32.012 1.00 0.00 ATOM 3 1 ATOM CG GLU -2.844 - 16.94831.615 1.00 0.00 4 1 **ATOM** CD GLU -3.465 -17.677 32.804 1.00 0.00 5 1 ATOM 6 OE1 GLU 1 -3.485 -18.926 32.757 1.00 0.00 -3.872 -16.982 33.758 1.00 0.00 ATOM 7 OE2 GLU 1 32.605 ATOM 8 C GLU 1 0.261 -16.283 1.00 0.00 GLU 32.660 1.00 ATOM 9 0 1 1.252 -15.556 0.00 ATOM 10 N LYS 2 0.306 - 17.53132.126 1.00 0.00 11 · CA LYS 2 1.513 -18.177 31.624 1.00 ATOM 0.00ATOM 12 CB LYS 2 1.339 -19.710 31.609 1.00 0.00ATOM CG LYS 2 0.846 -20.285 32.947 1.00 0.00 13 2 ATOM 14 CD LYS -0.640 -20.66432.860 1.00 ATOM 15 CE LYS 2 -1.247 -20.928 34.242 1.00 0.00 2 ATOM 16 NZ LYS -2.709 -21.110 34.159  $1.00 \cdot 0.00$ 2 30.237 ATOM 17 C LYS 1.894 -17.642 1.00 2 29.252 ATOM 18 0 LYS 1.867 -18.378 1.00 N HIS 30.160 ATOM 19 3 2.257 ~16.356 1.00 0.00 ATOM CA HIS 3 2.649 -15.702 28.920 1.00 0.00CBHIS 29.060 1.00 ATOM 3 2.464 -14.183 0.00 ATOM 22 CG HIS 3 2.614 -13.432 27.759 1.00 0.00 ND1 HIS 3 3.820 -13.350 27.079 1.00 0.00 ATOM CE1 HIS ATOM 3 3.613 -12.620 25.971 1.00 0.00 ATOM NE2 HIS 2.349 -12.205 25.861 3 1.00 0.00 CD2 HIS 3 1.722 -12.719 26.992 1.00 0.00 ATOM 26 C 28.559 **ATOM** HIS 3 4.083 -16.105 1.00 0.00 27 ATOM 0 HIS 3 5.011 -15.303 28.653 28 1.00 0.00 ATOM N ARG 4.260 -17.362 28.141 1.00 0.00 4 ATOM ARG 5.546 -17.923 27.755 30 CA 4 1.00 0.00 **ATOM** 31 CBARG 6.225 - 18.51429.003 1.00 0.00 ATOM CG ARG 7.718 -18.799 28.789 1.00 0.00 32 4 ATOM CD ARG 8.319 -19.421 30.055 1.00 0.00 ATOM NE ARG 9.742 -19.740 29.868 1.00 0.00 ATOM 35 CZARG 10.513 -20.362 30.776 1.00 0.00 31.962 ATOM NH1 ARG 10.005 -20.724 1.00 0.00 36 NH2 ARG 11.795 -20.623 30.491 1.00 0.00 ATOM 37 **ATOM** C ARG 5.315 -18.952 26.645 1.00 0.00 38 0 ATOM 39 ARG 5.789 -20.083 26.723 1.00 0.00 4.573 -18.552 25.605 ATOM 40 N ALA 1.00 0.00 5 ATOM CAALA 5 4.247 -19.405 24.473 1.00 0.00 41 ATOM 42 CB ALA 5 3.167 -20.418 24.877 1.00 0.00 ATOM 43 C 5 3.788 -18.545 23.296 1.00 0.00 ALA ATOM 44 0 ALA 5 2.590 -18.377 23.082 1.00 0.00 ATOM 45 N ARG 6 4.742 -18.004 22.530 1.00 0.00 CAATOM 46 ARG 6 4.456 -17.180 21.364 1.00 0.00

4.129 -15.729

21.771

5.249 -14.930 22.470 1.00 0.00

1.00

0.00

ATOM

ATOM

CBARG

CG ARG 6

6

47

48

	253				()			254
ATOM	49	CD	ARG	6	5.512 -13.58	1 21.776	1.00	0.00
ATOM	50	NE	ARG	6	5.965 -13.78		1.00	0.00
ATOM	51	CZ	ARG	6				
					6.400 -12.85		1.00	0.00
ATOM	52	NH1		6	6.728 -13.24		1.00	0.00
ATOM	53	NH2		6	6.517 -11.56		1.00	0.00
ATOM	54	C	ARG	6	5.587 -17.31		1.00	0.00
ATOM	55	0	ARG	6	6.429 -16.43		1.00	0.00
ATOM	56	N	LYS	7	5.614 -18.44		1.00	0.00
ATOM	57	CA	LYS	7	6.613 -18.73		1.00	0.00
ATOM	58	CB	LYS	7	7.905 -19.31		1.00	0.00
ATOM	59	CG	LYS	7	8.741 -18.26	9 19.961	1.00	0.00
ATOM	60	CD	LYS	7	10.138 -18.81	4 20.287	1.00	0.00
ATOM	61	CE	LYS	7	11.076 -17.70	6 20.786	1.00	0.00
ATOM	62	NZ	LYS	7	10.547 -17.01	4 21.976	1.00	0.00
ATOM	63	C	LYS	7	6.033 ~19.71	5 17.582	1.00	0.00
ATOM	64	0	LYS	7	6.142 -20.92	7 17.764	1.00	0.00
ATOM	65	N	ARG	8	5.434 -19.19	8 16.504	1.00	0.00
ATOM	66	CA	ARG	8	4.890 -20.04	0 15.446	1.00	0.00
ATOM	67	CB	ARG	8	4.029 -19.21	3 14.483	1.00	0.00
ATOM	68	CG	ARG	8	2.650 -18.92		1.00	0.00
ATOM	69	CD	ARG	8	1.759 -18.23		1.00	0.00
ATOM	70	NE	ARG	8	0.340 -18.40		1.00	0.00
ATOM	71	CZ	ARG	8	-0.669 -17.65		1.00	0.00
ATOM	72		ARG	8	-1.917 -17.88		1.00	0.00
ATOM	73		ARG	8	-0.444 -16.66		1.00	0.00
ATOM	74	С	ARG	8	6.038 -20.70		1.00	0.00
ATOM	75	0	ARG	8	7.165 -20.20		1.00	0.00
ATOM	76	N	GLN	9	5.748 -21.82		1.00	0.00
ATOM	77	CA	GLN	9	6.734 -22.54		1.00	0.00
ATOM	78	CB	GLN	9	6.288 -24.00		1.00	0.00
ATOM	79	CG	GLN	9	6.122 -24.75		1.00	0.00
ATOM	80	CD	GLN	9	5.757 -26.21		1.00	0.00
ATOM	81		GLN	9	6.531 -27.11		1.00	0.00
ATOM	82		GLN	9	4.586 -26.44		1.00	0.00
ATOM	83	C	GLN	9	6.907 -21.83		1.00	0.00
ATOM	84	0	GLN	9	6.318 -22.24		1.00	0.00
ATOM	85							0.00
		N	ALA	10	7.717 -20.77		1.00	
ATOM	86	CA	ALA	10	7.976 -20.02		1.00	0.00
ATOM	87	CB	ALA	10	8.933 -18.86		1.00	0.00
ATOM	88	C	ALA	10	8.552 -20.96		1.00	0.00
ATOM	89	0	ALA	10	9.403 -21.79		1.00	0.00
ATOM	90	N	TRP	11	8.076 -20.83		1.00	0.00
ATOM	91	CA	TRP	11	8.528 -21.67		1.00	0.00
ATOM	92	CB	TRP	11	7.488 -21.69		1.00	0.00
ATOM	93	CG	TRP	11	6.184 -22.38		1.00	0.00
ATOM	94		TRP	11	5.338 -22.09		1.00	0.00
ATOM	95		TRP	11	4.227 -22.91		1.00	0.00
ATOM	96		TRP	11	4.310 -23.77		1.00	0.00
ATOM	97		TRP	11	3.456 -24.77		1.00	0.00
ATOM	98	CH2	TRP	11	3.829 -25.50	3 4.657	1.00	0.00

```
255
                                                                   256
         99 CZ3 TRP
                                                   4.012 1.00 0.00
ATOM
                         11
                                  5.044 -25.217
ATOM
        100
            CE3 TRP
                         11
                                  5.893 -24.208
                                                   4.504
                                                         1.00 0.00
        101 CD2 TRP
                                  5.551 -23.463
                                                   5.653 1.00
ATOM
                         11
                                                                0.00
        102 C
                                  9.870 -21.171
                                                   6.711
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
                 TRP
                         11
        103
             0
                 TRP
                                 10.147 -19.972
                                                   6.748 1.00
                                                                0.00
ATOM
                         11
ATOM
        104 N
                 LEU
                         12
                                 10.695 -22.102
                                                   6.227 1.00
                                                                0.00
ATOM
        105 CA
                 LEU
                         12
                                 12.021 -21.857
                                                   5.677
                                                          1.00
                                                                0.00
        106
            CB
                 LEU
                         12
                                 13.052 -22.652
                                                   6.492 1.00
                                                                0.00
ATOM
        107
             CG LEU
                         12
                                 12.902 -22.531
                                                   8.021
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
ATOM
        108
             CD1 LEU
                                 13.914 -23.460
                                                   8.699
                                                          1.00
                                                                0.00
                         12
ATOM
        109
             CD2 LEU
                         12
                                 13.134 -21.095
                                                   8.505
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        110
             С
                 LEU
                         12
                                 12.010 -22.273
                                                   4.204
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        111
             0
                 LEU
                         12
                                 11.058 -22.928
                                                   3.771
                                                          1.00
                                                                0.00
                 TRP
ATOM
        112
             N
                         13
                                 13.049 -21.913
                                                   3.426
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        113
             CA
                 TRP
                         13
                                 13.087 -22.293
                                                   2.022
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 TRP
ATOM
        114
             CB
                         13
                                 14.363 -21.892
                                                   1.295
                                                         1.00
                                                                0.00
                 TRP
ATOM
        115
             CG
                         13
                                 15.651 -21.696
                                                   2.026
                                                          1.00
                                                                0.00
             CD1 TRP
ATOM
        116
                         13
                                 16.608 -20.928
                                                   1.486
                                                          1.00 0.00
             NE1 TRP
                                 17.696 -20.866
                                                          1.00
ATOM
        117
                         13
                                                   2.320
                                                                 0.00
             CE2 TRP
                                 17.503 -21.616
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        118
                         13
                                                   3.457
             CZ2 TRP
ATOM
                                 18.313 -21.863
                                                   4.575
                                                          1.00
                                                                 0.00
        119
                         13
             CH2 TRP
                                 17.832 -22.692
ATOM
        120
                         13
                                                   5.598
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             CZ3 TRP
                                  16.552 -23.257
                                                   5.488
                                                          1.00
                                                                 0.00
        121
                         13
                                                                 0.00
ATOM
        122
             CE3 TRP
                         13
                                  15.750 -22.996
                                                   4.362
                                                          1.00
             CD2 TRP
                                  16.196 -22.171
                                                          1.00
ATOM
        123
                         13
                                                   3.306
                                                                 0.00
        124
             C
                  TRP
                         13
                                  12.797 -23.766
                                                   1.812 1.00
                                                                0.00
ATOM
ATOM
        125
             0
                  TRP
                                  11.825 -24.056
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         13
                                                   1.146
ATOM
        126
             N
                  GLU
                                  13.590 -24.687
                                                   2.359
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         14
ATOM
        127
             CA
                 GLU
                                  13.381 -26.123
                                                   2.229
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         14
                                                   3.272 1.00 0.00
             CB
                 GLU
                                  14.191 -26.911
ATOM
        128
                         14
ATOM
        129
             CG
                 GLU
                         14
                                  15.669 -26.504
                                                   3.385
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        130
              CD
                 GLU
                                  16.326 -26.235
                                                   2:038
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         14
ATOM
        131
              OE1 GLU
                         14
                                  16.613 -27.215
                                                   1.318
                                                          1.00
                                                                 0.00
              OE2 GLU
ATOM
        132
                         14
                                  16.501 -25.045
                                                   1.699
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        133
             C
                  GLU
                         14
                                  11.899 -26.506
                                                   2.278
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  GLU
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        134
              0
                         14
                                  11.472 -27.309
                                                   1.459
             N
                  GLU
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        135
                         15
                                  11.108 -25.927
                                                   3.190
                 GLU
                                   9.681 -26.203
                                                   3.271
                                                          1.00
ATOM
        136
              CA
                                                                 0.00
                         15
ATOM
        137
              CB
                  GLU
                         15
                                   9.112 -25.727
                                                   4.609 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        138
              CG
                  GLU
                         15
                                   9.774 -26.477
                                                   5.772
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  GLU
                                   8.997 -26.283
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         139
              CD
                         15
                                                   7.064
ATOM
         140
              OE1 GLU
                         15
                                   9.288 -25.299
                                                   7.779
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OE2 GLU
                                   8.119 -27.129
                                                   7.339
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         141
                         15
         142
              C
                  GLU
                                   8.936 -25.614
                                                    2.061
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         15
ATOM
         143
              0
                  GLU
                         15
                                   8.228 -26.348
                                                   1.378
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         144
              N
                  ASP
                          16
                                   9.091 -24.315
                                                   1.770
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                   8.447 -23.670
ATOM
         145
              CA
                  ASP
                          16
                                                   0.618
                                                          1.00
                                                                 0.00
         146
              CB
                  ASP
                                   8.924 -22.210
                                                   0.494
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
                          16
ATOM
         147
              CG
                 ASP
                                   8.358 -21.277
                                                    1.558
                                                          1.00
                                                                 0.00
                          16
ATOM
              OD1 ASP
                                   8.246 -21.713
                                                   2.722 1.00 0.00
         148
                          16
```

```
257
                                                                   258
        149
ATOM
            OD2 ASP
                         16
                                  8.011 -20.135
                                                         1.00 0.00
                                                   1.180
ATOM
        150
             C
                 ASP
                         16
                                  8.800 -24.426
                                                 -0.675
                                                          1.00 0.00
ATOM
        151
             0
                 ASP
                         16
                                  7.936 -24.867
                                                  -1.433
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        152 N
                 ĹYS
                         17
                                 10.108 -24.564
                                                  -0.888
                                                          1.00
                                                                0.00
        153 CA
                                                          1.00
ATOM
                 LYS
                         17
                                 10.808 -25.229
                                                 -1.965
                                                                0.00
ATOM
        154
             CB
                 LYS
                         17
                                 12.320 -25.180
                                                 -1.621
                                                          1.00
                                                                0.00
                                                          1.00
ATOM
        155
             CG
                 LYS
                         17
                                 13.178 -25.788
                                                 -2.739
                                                                0.00
ATOM
        156
             CD
                 LYS
                         17
                                 14.675 -25.487
                                                 -2.560
                                                          1.00
                                                                0.00
             CE
                 LYS
ATOM
        157
                         17
                                 15.185 -25.945 -1.189
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        158
             NZ
                 LYS
                                 16.651 -25.858
                         17
                                                 -1.065
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        159
             C
                 LYS
                                 10.240 -26.647
                         17
                                                 -2.137
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        160
             0
                 LYS
                                  9.869 -27.029
                         17
                                                 -3.251
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        161
             N
                 ASN
                         18
                                 10.155 -27.410
                                                 -1.037
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        162 CA
                 ASN
                                  9.617 -28.766
                         18
                                                  -1.000
                                                          1.00
                                                                0.00
             CB
                 ASN
ATOM
        163
                         18
                                  9.775 - 29.356
                                                   0.413
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             CG
                 ASN
        164
                         18
                                  9.087 -30.699
                                                   0.636
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        165
             OD1 ASN
                                  8.677 -31.370
                                                  -0.306
                                                          1.00
                         18
                                                                 0.00
ATOM
        166
             ND2 ASN
                         18
                                  8.963 -31.095
                                                   1.903
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             C
                 ASN
                                  8.158 -28.767
                                                  -1.447
                                                          1.00
                                                                 0.00
        167
                         18
ATOM
        168
             0
                 ASN
                                  7.824 -29.481 -2.385
                         18
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        169
             N
                 LEU
                                  7.299 -27.979 -0.789
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         19
ATOM
        170
             CA
                 LEU
                         19
                                  5.875 -27.869
                                                 -1.091
                                                                 0.00
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        171
             CB
                 LEU
                         19
                                  5.262 -26.742
                                                 -0.244
                                                          1.00
ATOM
        172
             CG
                 LEU
                         19
                                  3.766 -26.512
                                                  -0.500
                                                           1.00
                                                                 0.00
             CD1 LEU
ATOM
        173
                         19
                                   2.960 -27.796
                                                  -0.295
                                                           1.00
                                                                 0.00
             CD2 LEU
                                  3.256 -25.416
ATOM
        174
                         19
                                                   0.445
                                                           1.00
                                                                 0.00
        175
             C
                 LEU
                                   5.645 -27.652
                                                  -2.584
ATOM
                         19
                                                          1.00
                                                                 0.00
             0
                                                                 0.00
ATOM
        176
                  LEU
                                   4.895 -28.397
                                                  -3.213
                                                           1.00
                         19
             N
                  ARG
ATOM
                                   6.310 -26.641
                                                  -3.149
                                                           1.00
                                                                 0.00
        177
                         20
             CA
                  ARG
                                                  -4.564
ATOM
        178
                         20
                                   6.228 - 26.310
                                                           1.00
                                                                 0.00
             CB
                  ARG
                                  7.117 -25.080
ATOM
        179
                         20
                                                  -4.806
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             CG
                  ARG
                                   7.235 -24.589
                                                  -6.260
                                                           1.00
                                                                 0.00
        180
                         20
             CD
                  ARG
                                                  -7.154
ATOM
        181
                         20
                                  8.177 -25.411
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        182
             NE
                 ARG
                         20
                                   9.421 -25.751
                                                  -6.448
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        183
             CZ
                 ARG
                         20
                                  10.176 -26.828
                                                  -6.705
                                                                 0.00
                                                           1.00
ATOM
        184
             NH1 ARG
                                  10.999 -27.292
                                                  -5.760
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         20
              NH2 ARG
ATOM
        185
                         20
                                  10.086 -27.461
                                                  -7.881
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        186
              C
                  ARG
                         20
                                   6.580 -27.549
                                                  -5.399
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        187
              0
                  ARG
                                   5.834 -27.904
                                                  -6.314
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         20
ATOM
        188
              N
                  SER
                         21
                                   7.692 -28.226
                                                  -5.075
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  SER
ATOM
        189
              CA
                         21
                                   8.097 -29.447
                                                  -5.773
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        190
              CB
                  SER
                         21
                                   9.419 -29.998
                                                  -5.202
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  SER
                                                           1.00
ATOM
         191
              0G
                                  10.439 -29.969
                                                  -6.184
                                                                 0.00
                         21
             C
                  SER
ATOM
         192
                         21
                                   6.996 - 30.509
                                                  -5.683
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         193
              0
                  SER
                         21
                                   6.665 -31.137
                                                  -6.684
                                                           1.00
                                                                 0.00
             N
                  GLY
                         22
ATOM
         194
                                   6.442 - 30.704
                                                  -4.485
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CA
                  GLY
                                   5.393 -31.661
                                                  -4.187
         195
                         22
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C
                  GLY
                         22
                                   4.178 -31.447
ATOM
         196
                                                  -5.080
                                                                 0.00
                                                           1.00
         197
              0
                  GLY
                                   3.718 -32.386
ATOM
                         22
                                                  -5.725
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         198
             N
                  VAL
                         23
                                   3.663 -30.215 -5.127
                                                           1.00
                                                                 0.00
```

	050				(101)				י בינולוניו
1 TOU	259		1741	00	0:500	00 074	5 040	1 00	260
ATOM	199		VAL	23			-5.948	1.00	0.00
ATOM	200	CB	VAL	23	2.090 -		-5.713	1.00	0.00
ATOM	201	CG1		23		27.988		1.00	0.00
ATOM	202	CG2		23	1.537 -		-4.294	1.00	0.00
ATOM	203	C	VAL	23	2.806 -		-7.421	1.00	0.00
ATOM	204	0	VAL	23	1.994 -		-8.100	1.00	0.00
ATOM	205	N	ARG	24	3.959 ~	-29.708	-7.926	1.00	0.00
ATOM	206	CA	ARG	24	4.316 -	-29.929	-9.322	1.00	0.00
MOTA	207	CB	ARG	24	5.585 -	-29.137	-9.666	1.00	0.00
ATOM	208	CG	ARG	24	5.393 -	-27.612	-9.612	1.00	0.00
ATOM	209	CD	ARG	24	4.568 -	-27.062	-10.785	1.00	0.00
ATOM	210	NE	ARG	24	4.534 -	-25.593	-10.741	1.00	0.00
ATOM	211	CZ	ARG	24	4.221 -	-24.779	-11.765	1.00	0.00
ATOM	212	NH1	ARG	24	3.813 -	-25.274	-12.940	1.00	0.00
ATOM	213	NH2	ARG	24	4.329 -	-23.456	-11.605	1.00	0.00
ATOM	214	С	ARG	24	4.492 -	-31.419	-9.653	1.00	0.00
ATOM	215	0	ARG	24	4.153 -	-31.843	-10.755	1.00	0.00
ATOM	216	N	LYS	25		-32.209		1.00	0.00
ATOM	217	CA	LYS	25		-33.630		1.00	0.00
ATOM	218	CB	LYS	25		-34.044		1.00	0.00
ATOM	219	CG	LYS	25			-8.356	1.00	0.00
ATOM	220	CD	LYS	25	•	-35.799		1.00	0.00
ATOM	221	CE	LYS	25		-34.996	-7.775	1.00	0.00
ATOM	222	NZ	LYS	25	10.643 -		-6.997	1.00	0.00
ATOM	223	C	LYS	25		-34.540	-8.767	1.00	0.00
ATOM	224	0	LYS	25		-35.492	-9.536	1.00	0.00
ATOM	225	N	TYR	26		-34.290	-7.781	1.00	0.00
ATOM	226	CA	TYR	26		-35.132	-7.483	1.00	0.00
ATOM	227	CB	TYR	26		-35.561	-6.012	1.00	0.00
ATOM	228	CG	TYR			-36.023	-5.597	1.00	0.00
ATOM	229		TYR	26		-37.048		1.00	0.00
ATOM	230			26		-37.466		1.00	0.00
ATOM	231	CZ	TYR	26		-36.867	-4.848	1.00	0.00
ATOM	232	OH	TYR	26		-37.280	-4.491	1.00	0.00
ATOM	233		TYR	26		-35.840	-4.132	1.00	0.00
ATOM	234		TYR	26		-35.420	-4.507	1.00	0.00
ATOM	235	C	TYR	26		-34.486	-7.774	1.00	0.00
ATOM	236	0	TYR	26	-0.314		-7.673	1.00	0.00
ATOM	237	·N	GLY			-33.199	-8.130	1.00	0.00
ATOM	238	CA	GLY	27	-0.553		-8.416	1.00	0.00
ATOM	239	C	GLY	27	-1.090		-7.149	1.00	0.00
ATOM	240	0	GLY	27	-0.815		-6.037	1.00	0.00
ATOM	240		GLU	28	-1.861			1.00	
ATOM	241	N Ca	GLU	28 28			-7.321 -6.227		0.00
ATOM	242	CB	GLU	28	-2.457 - -3.048 -		-6.227 -6.811	1.00	0.00
ATOM	243	CG	GLU	28	-3.046 - -3.359 -				0.00
ATOM	244	CD	GLU	28 28	-3.359 · -3.653 ·		-5.749 -6.396	1.00	0.00
ATOM	245		GLU	28 28	-3.003 · -2.728 ·			1.00	0.00
ATOM	240		GLU	28 28	-2.728 - -4.786 -		-7.034 -6.246	1.00	0.00
		C						1.00	0.00
ATOM	248	C	GLU	40	-3.490	- <b>ა</b> 0.843	-5.485	1.00	0.00

	001				(132)				003-13
, more	261	^	O. I.	00	. 050 04 550			262	
ATOM	249	0	GLU	28	-4.052 -31.776		1.00	0.00	
ATOM	250	N	GLY	29	-3.729 -30.540	-4.204	1.00	0.00	
ATOM	251	CA	GLY	29	-4.672 -31.276		1.00	0.00	
ATOM	252	C	GLY	29	-4.151 -32.681	-3.074	1.00	0.00	
ATOM	253	0	GLY	29	-4.841 -33.670	-3.313	1.00	0.00	
ATOM	254	N	ASN	30	-2.919 -32.759		1.00	0.00	
ATOM	255	CA	ASN	30	-2.235 -34.000	-2.215	1.00	0.00	•
ATOM	256	CB	ASN	30	-1.497 -34.532		1.00	0.00	
ATOM	257	CG	ASN	30	-2.457 -35.172	-4.451	1.00	0.00	
ATOM	258	0D1	ASN	30	-3.082 -36.185	-4.137	1.00	0.00	
ATOM	259	ND2	ASN	30	-2.577 -34.590	-5.641	1.00	0.00	
ATOM	260	C	ASN	30	-1.265 -33.712	-1.072	1.00	0.00	
ATOM	261	0	ASN	30	-0.104 -34.102	-1.116	1.00	0.00	
ATOM	262	N	TRP	31	-1.749 -33.007	-0.052	1.00	0.00	
ATOM	263	CA	TRP	31	-0.967 -32.586	1.102	1.00	0.00	
ATOM	264	CB	TRP	31	-1.782 -31.572	1.904	1.00	0.00	
ATOM	265	CG	TRP	31	-2.569 -30.644	1.028	1.00	0.00	
ATOM	266	CD1	TRP	31	-3.915 -30.528	0.993	1.00	0.00	
ATOM	267	NE1	TRP	31	-4.275 -29.600	0.039	1.00	0.00	
ATOM	268	CE2	TRP	31	-3.171 -29.071	-0.589	1.00	0.00	
ATOM	269	CZ2	TRP	31	-3.016 -28.122	-1.608	1.00	0.00	
ATOM	270	CH2	TRP	31	-1.723 -27.798	-2.043	1.00	0.00	
ATOM	271	CZ3	TRP	31	-0.608 -28.417	-1.458	1.00	0.00	
ATOM	272	CE3	TRP	31	-0.774 -29.368	-0.437	1.00	0.00	
ATOM	273	CD2	TRP	31	-2.061 -29.719	0.025	1.00	0.00	
ATOM	274	C	TRP	31	-0.486 -33.780	1.921	1.00	0.00	
ATOM	275	0	TRP	31	0.688 -33.854	. 2.278	1.00	0.00	
ATOM	276	N	SER	32	-1.383 -34.729	2.194	1.00	0.00	
ATOM	277	CA	SER	32	-1.062 -35.950	2.920	1.00	0.00	
ATOM	278	CB	SER	32	-2.327 -36.797	3.073	1.00	0.00	
.ATOM	279	OG	SER	32	-2.028 -38.083	3.574	1.00	0.00	
ATOM	280	C	SER	32	0.021 -36.714	2.159	1.00	0.00	
ATOM	281	0	SER	32	1.035 -37.115	2.732	1.00	0.00	
ATOM	282	N	LYS	33	-0.194 -36.902	0.851	1.00	0.00	
ATOM	283	CA	LYS	33	0.750 -37.602	-0.004	1.00	0.00	
ATOM	284	CB	LYS	33	0.273 -37.674		1.00	0.00	
ATOM	285	CG	LYS	33	-1.241 -37.585		1.00	0.00	
ATOM	286	CD	LYS	33	-2.128 -38.595		1.00	0.00	•
ATOM	287	CE	LYS	33	-3.552 -38.640		1.00	0.00	
ATOM	288	NZ	LYS	33	-4.164 -37.307		1.00		
ATOM	289	C	LYS	33	2.110 -36.906		1.00		
ATOM	290	0	LYS	33	3.121 -37.549		1.00		
ATOM	291	N	ILE	34	2.114 -35.580		1.00	0.00	
ATOM	292	CA	ILE	34	3.293 -34.733		1.00		
ATOM	293	CB	ILE	34	2.911 -33.264		1.00		
ATOM	294		? ILE	34	3.920 -32.273		1.00		
ATOM	295		ILE	34	2.788 -33.076		1.00		
ATOM	296		ILE	34	2.131 -31.752		1.00		
ATOM	297	C	ILE	34	3.998 -34.957		1.00		
ATOM	298	0	ILE	34	5.214 -35.110	1.380	1.00	0.00	

					(133)				特開20
	263				(100)				264
ATOM	299	N	LEU	35		-35.001	2.500	1.00	0.00
ATOM	300	CA	LEU	35	3.851	-35.242	3.818	1.00	0.00
ATOM	301	CB	LEU	35	2.776	-35.199	4.919	1.00	0.00
ATOM	302	CG	LEU	35	2.409	-33.766	5.321	1.00	0.00
ATOM	303	CD1	LEU	35	1.020	-33.727	5.969	1.00	0.00
ATOM	304	CD2	LEU	35	3.431	-33.202	6.318	1.00	0.00
ATOM	305	C	LEU	35	4.573	-36.588	3.851	1.00	0.00
ATOM	306	0	LEU	35	5.674	-36.681	4.395	1.00	0.00
ATOM	307	N	LEU	36	3.960	-37.631	3.275	1.00	0.00
ATOM	308	CA	LEU	36	4.558	-38.959	3.241	1.00	0.00
ATOM	309	СВ	LEU	36	3.560	-40.005	2.711	1.00	0.00
ATOM	310	CG	LEU	36		-40.691	3.825	1.00	0.00
ATOM	311		LEU	36		-39.736	4.543	1.00	0.00
ATOM	312		LEU	36		-41.848	3.223	1.00	0.00
ATOM	313	C	LEU	36		-38.940	2.403	1.00	0.00
ATOM	314	0	LEU	36		-39.483	2.827	1.00	0.00
ATOM	315	N	HIS	37		-38.322	1.218	1.00	0.00
ATOM	316	CA	HIS	37		-38.237	0.322	1.00	0.00
ATOM	317	СВ	HIS			-37.608		1.00	0.00
ATOM	318	CG	HIS	37		-38.424	-1.797	1.00	0.00
ATOM	319		HIS	37		-39.724	-2.206	1.00	0.00
ATOM	320		HIS	37		-40.151	-2.876	1.00	0.00
ATOM	321		HIS	37		-39.229	-2.948	1.00	0.00
ATOM	322		HIS	37		-38.141	-2.264	1.00	0.00
ATOM	323	C	HIS	37		-37.438	0.935	1.00	0.00
ATOM	324	0	HIS	37		-37.905	0.939	1.00	0.00
ATOM	325	N	TYR	38		-36.229	1.423	1.00	0.00
ATOM	326	CA	TYR	38		-35.298	2.001	1.00	0.00
ATOM	327	CB	TYR	38 ·		-34.217	0.958	1.00	0.00
ATOM	328	CG	TYR	38		-34.722	-0.425	1.00	0.00
ATOM	329		TYR	38 3.		-34.389	-1.538	1.00	0.00
ATOM	330		TYR	38		-34.855			
ATOM	331	CZ	TYR	38		-35.658	-2.989	1.00	
ATOM	332	OH	TYR	38		-36.119	-4.229	1.00	0.00
ATOM	333		TYR	38		-35.994	-1.881	1.00	0.00
ATOM	334		TYR	38		-35.525	-0.601	1.00	
ATOM	335	€ €	TYR	38		-34.660	3.260	1.00	0.00
ATOM	336	0	TYR	38		-34.021	3.196	1.00	0.00
ATOM	337	N	LYS	39		-34.829	4.409	1.00	0.00
ATOM	338	CA	LYS	39		-34.292	5.683	1.00	0.00
ATOM	339	CB	LYS	39		-35.011			
		CG					6.836	1.00	0.00
ATOM	340	CD	LYS	39 30		-36.513	6.838	1.00	0.00
ATOM	341		LYS	39 30		-37.273 -36.770	7.948	1.00	
ATOM	342	CE NZ	LYS	39 30		-36.779 -36.780	9.371	1.00	
ATOM	343	NZ C	LYS	39 30		-36.789	9.680	1.00	
ATOM	344		LYS	39		-32.768	5.778	1.00	
ATOM	345	0 N	LYS	39 40	7 000	-32.155	4.970	1.00	0.00

ATOM

ATOM

ATOM

346 N PHE

347 CA PHE

348 CB PHE

40

40

40

7.868 -32.178 6.784 1.00 0.00

7.854 -30.752 7.100 1.00 0.00 6.522 -30.142 6.639 1.00 0.00

					(134)				171H1 C U
	265								266
ATOM	349	CG	PHE	40	6.397	-29.974	5.137	1.00	0.00
ATOM	350	CD1	PHE	40	6.113	-31.079	4.315	1.00	0.00
ATOM	351	CE1	PHE	40	6.005	-30.917	2.926	1.00	0.00
ATOM	352	CZ	PHE	40	6.175	-29.647	2.349	1.00	0.00
ATOM	353	CE2	PHE	40	6.459	-28.543	3.169	1.00	0.00
ATOM	354	CD2	PHE	40	6.570	-28.704	4.559	1.00	0.00
ATOM	355	С	PHE	40	8.025	-30.576	8.611	1.00	0.00
ATOM	356	0	PHE	40	7.961	-31.554	9.360	1.00	0.00
ATOM	357	N	ASN	41	8.235	-29.333	9.064	1.00	0.00
ATOM	358	CA	ASN	41		-29.008	10.475	1.00	0.00
ATOM	359	CB	ASN	41		-27.637	10.633	1.00	0.00
ATOM	360	CG	ASN	41		-27.676	10.272	1.00	0.00
ATOM	361	OD1		41		-28.511	10.783	1.00	0.00
ATOM	362		ASN	41		-26.767	9.410	1.00	0.00
ATOM	363	С	ASN	41		-29.060	11.214	1.00	0.00
ATOM	364	0	ASN	41		-28.025	11.539	1.00	0.00
ATOM	365	N	ASN	42		-30.283	11.479	1.00	0.00
ATOM	366	CA	ASN	42		-30.599	12.195	1.00	0.00
ATOM	367	СВ	ASN	42		-30.367	13.707	1.00	0.00
ATOM	368	CG	ASN	42		-30.799	14.239	1.00	0.00
ATOM	369		ASN	42		-31.989	14.306	1.00	0.00
ATOM	370		ASN	42		-29.827	14.604	1.00	0.00
ATOM	371	C	ASN	42		-29.823	11.623	1.00	0.00
ATOM	372	0	ASN	42		-28.935	12.283	1.00	0.00
		N	ARG	43		-30.157		1.00	
ATOM ATOM	373 374	CA	ARG	43 43		-29.510	10.391 9.692		0.00 $0.00$
								1.00	
ATOM	375	CB	ARG	43		-28.663	8.543	1.00	0.00
ATOM	376	CD	ARG	43		-27.768	9.057	1.00	0.00
ATOM	377	CD	ARG	43		-26.636	8.074	1.00	0.00
ATOM	378	NE	ARG	43		-25.948	8.367	1.00	0.00
ATOM	379	CZ	ARG	43		-24.902	9.191	1.00	0.00
ATOM	380		ARG	43		-24.413	9.900	1.00	0.00
ATOM	381		ARG	43		-24.324	9.303	1.00	0.00
ATOM	382	C	ARG	43		-30.546		1.00	0.00
ATOM	383	0	ARG	43		-31.725	9.070	1.00	0.00
ATOM	384	N	THR			-30.087	8.983	1.00	0.00
ATOM	385	CA	THR			-30.894	8.572	1.00	0.00
ATOM	386	CB	THR			-30.588	9.550	1.00	0.00
ATOM	387		THR			-30.836	11.009	1.00	0.00
ATOM	388	0G1				-29.233	9.378	1.00	
ATOM	389	C	THR			-30.546	7.164	1.00	
ATOM	390	0	THR			-29.593	6.540	1.00	
ATOM	391	N	SER			-31.317	6.698	1.00	
ATOM	392	CA	SER			-31.108	5.420	1.00	0.00
ATOM	393	CB	SER			-32.195		1.00	
ATOM	394	0G	SER			-32.046	3.999	1.00	
ATOM	395	C	SER			-29.688	5.408	1.00	
ATOM	396	0	SER			-29.005	4.389	1.00	
ATOM	397	N	VAL			-29.236	6.555	1.00	
ATOM	398	CA	VAL	46	-4.499	-27.901	6.730	1.00	0.00

	267							268
ATOM	399	CB	VAL	46	-5.109 -27.737	8.138	1.00	0.00
ATOM	400	CG1	VAL	46	-5.658 -26.320	8.347	1.00	0.00
ATOM	401	CG2	VAL	46	-6.248 -28.731	8.383	1.00	0.00
ATOM	402	С	VAL	46	-3.405 -26.861	6.472	1.00	0.00
ATOM	403	0	VAL	46	-3.581 -25.999	5.616	1.00	0.00
ATOM	404	N	MET	47	-2.283 -26.941	7.202	1.00	0.00
ATOM	405	CA	MET	47	-1.162 -26.012	7.048	1.00	0.00
ATOM	406	СВ	MET	47	0.042 -26.498	7.870	1.00	0.00
ATOM	407	CG	MET	47	0.071 -26.014	9.322	1.00	0.00
ATOM	408	SD	MET	47	-1.399 -26.359	10.320	1.00	0.00
ATOM	409	CE	MET	47	-0.783 -25.790	11.917	1.00	0.00
ATOM	410	C	MET	47	-0.752 -25.879	5.576	1.00	0.00
ATOM	411	0	MET	47	-0.692 -24.774	5.035	1.00	0.00
ATOM	412	N	LEU	48	-0.463 -27.017	4.939	1.00	0.00
ATOM	413	CA	LEU	48	-0.040 -27.096	3.547	1.00	0.00
ATOM	414	CB	LEU	48	0.203 -28.569	3.207	1.00	0.00
ATOM	415	CG	LEU	48	1.423 -29.136	3.953	1.00	0.00
ATOM	416		LEU	48	1.299 -30.646	4.141	1.00	0.00
ATOM	417		LEU	48	2.726 -28.876	3.194	1.00	0.00
ATOM	418	C	LEU	48	-1.075 -26.461	2.616	1.00	0.00
ATOM	419	0	LEU	48	-0.723 -25.626	1.782	1.00	0.00
ATOM	420	N	LYS	49	-2.347 -26.847	2.769	1.00	0.00
ATOM	421	CA	LYS	49	-3.463 -26.333	1.988	1.00	0.00
ATOM	422	CB	LYS	49	-4.763 -26.982		1.00	0.00
ATOM	423	CG	LYS	49	-6.063 -26.411	1.903	1.00	0.00
ATOM	424	CD	LYS	49	-6.690 -25.225	2.666	1.00	0.00
ATOM	425	CE	LYS	49	-6.992 -25.522	4.144	1.00	0.00
ATOM	426	NZ	LYS	49	-7.870 -24.500	4.750	1.00	0.00
ATOM	427	C	LYS	49	-3.514 -24.811	2.074	1.00	0.00
ATOM	428	0	LYS	49	-3.495 -24.135	1.046	1.00	0.00
ATOM	429	N	ASP	50	-3.590 -24.283	3.300	1.00	0.00
ATOM	430	CA	ASP	50	-3.675 -22.854	3.554	1.00	0.00
ATOM	431	СВ	ASP	50	-3.796 -22.565	5.053	1.00	0.00
ATOM	432	CG	ASP	50	-5.189 -22.904	5.565	1.00	0.00
ATOM	433		ASP	50	-5.278 -23.725	6.500	1.00	0.00
ATOM	434		ASP	50	-6.164 -22.354	5.000	1.00	0.00
ATOM	435	C	ASP	50	-2.513 -22.107	2.922	1.00	0.00
ATOM	436	0	ASP	50	-2.722 -21.116	2.222	1.00	0.00
ATOM	437	N	ARG	51	-1.287 -22.576	3.159	1.00	0.00
ATOM	438	CA	ARG	51	-0.130 -21.916	2.592	1.00	0.00
ATOM	439	CB	ARG	51	1.159 -22.563	3.083	1.00	0.00
ATOM	440	CG	ARG	51	2.335 -21.694	2.619	1.00	0.00
ATOM	441	CD	ARG	51	3.630 -22.223	3.217	1.00	0.00
ATOM	442	NE	ARG	51	4.460 -21.139	3.743	1.00	0.00
ATOM	443	CZ	ARG	51	5.301 -20.374	3.043	1.00	0.00
ATOM	444		ARG	51	5.423 -20.534	1.722	1.00	0.00
ATOM	445		ARG	51	6.008 -19.447	3.691	1.00	0.00
ATOM	446	C	ARG	51	-0.179 -21.899	1.068	1.00	0.00
ATOM	447	0	ARG	51	0.042 -20.846	0.476	1.00	0.00
ATOM	448	N	TRP	52	-0.449 -23.040	0.421	1.00	0.00

	269								270
ATOM	449	CA	TRP	52	-0.474	-23.067	-1.026	1.00	0.00
ATOM	450		TRP	52		-24.488	-1.565	1.00	0.00
ATOM	451		TRP	52		-24.527	-3.053	1.00	0.00
ATOM	452	CD1		52		-24.751	-3.922	1.00	0.00
ATOM	453	NE1		52		-24.711	-5.213	1.00	0.00
ATOM	454	CE2		52		-24.446	-5.241	1.00	0.00
ATOM	455	CZ2		52		-24.301	-6.285	1.00	0.00
ATOM	456	CH2		52		-24.026	-5.977	1.00	0.00
ATOM	457	CZ3		52		-23.901	-4.634	1.00	0.00
ATOM	458	CE3		52		-24.048	-3.593	1.00	0.00
ATOM	459	CD2		52		-24.324	-3.869	1.00	0.00
ATOM	460	C	TRP	52 52		-22.153	-1.596	1.00	0.00
ATOM	461	0	TRP	52		-21.461	-2.576	1.00	0.00
ATOM	462	N	ARG	53		-22.125			
ATOM	463	CA	ARG	53		-21.242	-1.010	1.00	0.00
ATOM	464	CB	ARG	53		-21.586	-1.532 -1.034	1.00	$0.00 \\ 0.00$
	465	CG	ARG	53				1.00	
ATOM ATOM	466	CD	ARG	53 53		-21.384	0.462	1.00	0.00
	467		ARG			-21.861	0.825	1.00	0.00
ATOM ATOM		NE CZ	ARG	53 53		-21.692	2.259	1.00	0.00
ATOM	468					-21.422 -21.160	2.778	1.00	0.00
	469		ARG	53			4.087	1.00	0.00
ATOM	470		ARG	53 53		-21.426	2.006	1.00	0.00
ATOM	471	C	ARG	53		-19.773	-1.367	1.00	0.00
ATOM	472	0 N	ARG	53		-18.991	-2.301	1.00	0.00
ATOM	473	N	THR	54		-19.392	-0.215	1.00	0.00
ATOM	474	CA	THR	54		-18.027	-0.004	1.00	0.00
ATOM	475	CB	THR	54		-17.861	1.395	1.00	0.00
ATOM	476		THR	54		-16.410	1.626	1.00	0.00
ATOM	477		THR	54		-18.209	2.419	1.00	0.00
ATOM	478	C	THR	54		-17.685	-1.070	1.00	0.00
ATOM	479	0 N	THR	54 55		-16.664	-1.750	1.00	0.00
ATOM .	480	N	MET	55 55		-18.551	-1.200	1.00	0.00
ATOM	481	CA	MET	55 55		-18.382	-2.134	1.00	0.00
ATOM	482 483	CB	MET	55 55		-19.543	-2.019	1.00	0.00
ATOM ATOM	484	CG SD	MET MET	55 55		-19.240 -20.457	-2.795 -4.035	1.00	0.00
ATOM	485	CE	MET	55 55		-20.457 -20.399	-4.035 -5.204	1.00	0.00
ATOM	486	C	MET	55		-18.227	-3.564	1.00	0.00
ATOM	487	0	MET	55 55		-17.262	-4.223	1.00	0.00
ATOM	488	N	LYS	56		-19.159	-4.223	1.00	0.00
ATOM	489	CA	LYS	56		-19.080	-5.440	1.00	0.00
ATOM	490	CB	LYS	56		-20.393	-5.901	1.00	0.00
ATOM	491	CG	LYS	56		-20.582	-5.461	1.00	0.00
ATOM	492	CD	LYS	56		-21.980	-5.825	1.00	0.00
ATOM	493	CE	LYS	56		-22.165	-7.347	1.00	0.00
ATOM	494	NZ	LYS	56		-23.505	-7.735	1.00	0.00
ATOM	495	C	LYS	56		-17.843	-5.676	1.00	0.00
ATOM	495	0	LYS	56		-17.272	-6.761	1.00	0.00
ATOM	497	N	LYS	57		-17.419	-4.671	1.00	0.00
ATOM	498	CA	LYS	57		-16.237	-4.775	1.00	0.00
HIUM	430	CA	LIS	Ji	3.433	10.237	4.113	1.00	0.00

```
271
ATOM
        499
             CB
                LYS
                        57
                                -4.355 -16.148 -3.532 1.00 0.00
                                -5.197 -14.866 -3.495
ATOM
        500
             CG
                 LYS
                        57
                                                        1.00
                                                              0.00
ATOM
        501
             CD
                 LYS
                        57
                                -6.117 -14.888 -2.266
                                                        1.00
                                                               0.00
                 LYS
ATOM
        502
             CE
                        57
                                -6.798 -13.535 -2.025
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        503
             NZ
                 LYS
                        57
                                -7.650 -13.124 -3.156
                                                        1.00
                                                              0.00
             C
                 LYS
ATOM
        504
                        57
                                -2.601 - 14.978 - 4.949
                                                        1.00
                                                              0.00
             0
                 LYS
ATOM
        505
                        57
                                -2.844 -14.193 -5.862
                                                        1.00
                                                               0.00
                 LEU
        506 N
ATOM
                                -1.619 -14.773 -4.063
                                                        1.00
                                                              0.00
        507
             CA
                 LEU
ATOM
                        58
                                -0.762 -13.590 -4.075
                                                        1.00
                                                               0.00
        508
             CB
                 LEU
                        58
ATOM
                                -0.158 -13.381 -2.680
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        509
             CG
                 LEU
                                                -1.582
                        58
                                -1.222 -13.180
                                                        1.00
                                                               0.00
             CD1 LEU
ATOM
                                -0.524 -13.073 -0.226
        510
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
             CD2 LEU
                                -2.061 -11.913 -1.796
        511
                        58
                                                        1.00
                                                              0.00
        512 C
ATOM
                 LEU
                                                -5.165
                        58
                                 0.315 - 13.630
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
             0
                 LEU
                                                -5.893
        513
                        58
                                 0.484 - 12.655
                                                        1.00
                                                               0.00
            N
                 LYS
ATOM
        514
                                 1.047 -14.743 -5.287
                        59
                                                        1.00
                                                              0.00
ATOM
                LYS
        515
             CA
                                 2.101 -14.920 -6.283
                        59
                                                        1.00
                                                              0.00
             CB
                LYS
ATOM
        516
                        59
                                 2.853 -16.232 -6.023
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
             CG
                LYS
        517
                                  4.095 -16.374
                                                -6.914
                        59
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        518
             CD
                 LYS
                        59
                                  4.823 -17.686
                                                -6.591
                                                               0.00
                                                         1.00
ATOM
             CE
                LYS
                                                -7.532
        519
                        59
                                 6.010 - 17.932
                                                         1.00
                                                               0.00
             NZ
                LYS
ATOM
        520
                        59
                                 7.054 - 16.898
                                                -7.398
                                                        1.00
                                                              0.00
ATOM
        521
             C
                 LYS
                                 1.501 -14.908
                                                -7.689
                                                         1.00
                                                               0.00
                        59
ATOM
        522
             0
                 LYS
                        59
                                 2.128 -14.406 -8.618
                                                        1.00
                                                              0.00
ATOM
        523
             N
                 LEU
                                 0.291 -15.466 -7.811 1.00
                        60
                                                              0.00
ATOM
        524
             CA
                LEU
                        60
                                 -0.516 -15.576 -9.012 1.00
                                                              0.00
ATOM
        525
             CB
                LEU
                        60
                                 -0.548 -14.271 -9.832
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        526
             CG
                 LEU
                        60
                                 -1.637 -14.249 -10.921
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        527
             CD1 LEU
                        60
                                 -3.055 -14.336 -10.341
                                                        1.00
                                                               0.00
             CD2 LEU
ATOM
        528
                        60
                                 -1.507 -12.948 -11.721
                                                         1.00
                                                              0.00
ATOM
        529
             С
                 LEU
                        60
                                 -0.180 -16.817 -9.832
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
             0
                 LEU
        530
                        60
                                 0.497 - 16.735 - 10.854
                                                         1.00
                                                               0.00
             N
ATOM
        531
                 ILE
                                 -0.697 -17.963 -9.378
                                                         1.00
                                                               0.00
             CA ILE
ATOM
        532
                        61
                                 -0.574 -19.260 -10.032
                                                         1.00
                                                               0.00
             CB ILE
ATOM
        533
                                 0.498 -20.142 -9.353
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
             CG2 ILE
        534
                                 0.512 - 21.558
                                                -9.948
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        535
             CG1 ILE
                                 1.870 -19.460 -9.536
                        61
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
             CD1 ILE
        536
                                  3.070 -20.348 -9.199
                                                         1.00
                        61
                                                               0.00
ATOM
        537
             C
                 ILE
                        61
                                 -1.987 -19.855 -10.072
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        538
             0
                 ILE
                                 -2.756 -19.699 -9.124
                                                               0.00
                         61
                                                         1.00
                 SER
ATOM
        539
             N
                        62
                                 -2.330 -20.501 -11.190 1.00
                                                               0.00
ATOM
        540
             CA
                 SER
                         62
                                 -3.620 -21.109 -11.477
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
             CB
                 SER
        541
                         62
                                 -4.030 -20.655 -12.890 1.00
                                                               0.00
ATOM
        542
             0G
                 SER
                         62
                                 -5.323 -21.115 -13.226
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        543
             C
                 SER
                         62
                                 -3.531 -22.632 -11.312 1.00
                                                               0.00
ATOM
        544
             0
                 SER
                         62
                                 -3.106 -23.114 -10.262
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        545
             N
                 SER
                         63
                                 -3.943 -23.393 -12.329
                                                         1.00
                                                               0.00
             CA
                 SER
                         63
                                                               0.00
ATOM
        546
                                 -3.935 -24.847 -12.338
                                                        1.00
                 SER
ATOM
        547
             CB
                         63
                                 ~5.119 -25.383 -11.523
                                                               0.00
                                                        1.00
ATOM
        548
            OG SER
                         63
                                 -6.327 -24.792 -11.956 1.00 0.00
```

	273				2	74
ATOM	549	С	SER	63	-3.998 -25.318 -13.790 1.00 0.00	
ATOM	550	0	SER	63	-5.072 -25.299 -14.391 1.00 0.00	
ATOM	551	N	ASP	64	-2.850 -25.725 -14.341 1.00 0.00	
ATOM	552	CA	ASP	64	-2.689 -26.184 -15.716 1.00 0.0	
ATOM	553	CB	ASP	64	-3.337 -27.567 -15.905 1.00 0.0	
ATOM	554	CG	ASP	64	-3.006 -28.193 -17.257 1.00 0.0	
ATOM	555	OD1		64	-3.882 -28.915 -17.780 1.00 0.0	
ATOM	556	OD2		64	-1.872 -27.965 -17.734 1.00 0.0	
ATOM	557	C	ASP	64	-3.211 -25.119 -16.684 1.00 0.0	
ATOM	558	0	ASP	64	-4.021 -25.394 -17.566 1.00 0.0	
ATOM	559	N	SER	65	-2.751 -23.877 -16.497 1.00 0.0	
ATOM	560	CA	SER	65	-3.135 -22.723 -17.294 1.00 0.0	
ATOM	561	CB	SER	65	-4.488 -22.186 -16.804 1.00 0.0	
ATOM	562	OG	SER	65	-5.544 -23.056 -17.162 1.00 0.0	
ATOM	563	C	SER	65	-2.036 -21.667 -17.183 1.00 0.0	
ATOM	564	0	SER	65	-2.203 -20.669 -16.484 1.00 0.0	
ATOM	565	N	GLU	66	-0.920 -21.902 -17.886 1.00 0.0	
ATOM	566	CA	GLU	66	0.248 -21.030 -17.924 1.00 0.0	
ATOM	567	CB	GLU	66	-0.090 -19.719 -18.658 1.00 0.0	
ATOM	568	CG	GLU	66	1.170 -18.962 -19.099 1.00 0.0	
ATOM	569	CD	GLU	66	0.816 -17.728 -19.924 1.00 0.0	
ATOM	570		GLU	66	1.029 -16.611 -19.405 1.00 0.0	
ATOM	571		GLU	66	0.341 -17.926 -21.062 1.00 0.0	
ATOM	572	C	GLU	66	0.796 -20.833 -16.507 1.00 0.0	
ATOM	573	0	GLU	66	0.776 -19.728 -15.967 1.00 0.0	
ATOM	574	N	ASP	67	1.275 -21.934 -15.916 1.00 0.0	
ATOM	575	CA	ASP	67	1.816 -21.985 -14.566 1.00 0.0	
ATOM	576	СВ	ASP	67	1.004 -22.996 -13.747 1.00 0.0	
ATOM	577	CG	ASP	67	-0.460 -22.586 -13.663 1.00 0.0	
ATOM	578	0D1	ASP	67	-1.302 -23.348 -14.185 1.00 0.0	)0
ATOM	579	0D2	ASP	· 67	-0.718 -21.512 -13.083 1.00 0.0	)0
ATOM	580	С	ASP	67	3.288 -22.382 -14.616 1.00 0.0	00
ATOM	581	0T1	ASP	67	4.015 -21.823 -13.767 1.00 0.0	)0
ATOM	582	0T2	ASP	67	3.514 -23.536 -15.044 1.00 0.0	00
ATOM	583	05'	GUA	68	-6.080 -39.444 11.320 1.00 0.0	)0
ATOM	584	C5'	GUA	68	-5.839 -40.238 10.176 1.00 0.0	)0
ATOM	585	C4'	GUA	68	-6.297 -39.528 8.898 1.00 0.0	)0
ATOM	586	04'	GUA	68	-7.657 -39.148 8.979 1.00 0.0	)0
ATOM	587	C1'	GUA	68	-7.897 -38.202 7.961 1.00 0.0	)0
ATOM	588	N9	GUA	68	-9.121 -37.427 8.250 1.00 0.0	
ATOM	589	C8	GUA	68	-9.465 -36.807 9.420 1.00 0.0	
ATOM	590	N7	GUA	68	-10.643 -36.246 9.404 1.00 0.0	
ATOM	591	C5	GUA	68	-11.109 -36.494 8.116 1.00 0.0	
ATOM	592	C6	GUA	68	-12.339 -36.121 7.492 1.00 0.0	
ATOM	593	06	GUA	68	-13.306 -35.556 7.997 1.00 0.0	
ATOM	594	N1	GUA	68	-12.378 -36.474 6.148 1.00 0.0	
ATOM	595	C2	GUA	68	-11.372 -37.151 5.487 1.00 0.0	
ATOM	596	N2	GUA	68	-11.539 -37.409 4.189 1.00 0.0	
ATOM	597	N3	GUA	68	-10.236 -37.541 6.081 1.00 0.0	
ATOM	598	C4	GUA	68	-10.164 -37.179 7.388 1.00 0.0	JU

```
275
                                                                    276
ATOM
        599
             C3'
                 GUA
                                                   8.587 1.00 0.00
                         68
                                 -5.535 -38.230
                                                          1.00
ATOM
        600
             C2'
                 GUA
                         68
                                 -6.658 -37.333
                                                   8.048
                                                                0.00
ATOM
        601
             03'
                 GUA
                                 -4.507 -38.525
                                                          1.00
                         68
                                                   7.651
                                                                 0.00
             P
                 THY
ATOM
        602
                         69
                                 -3.553 -37.399
                                                   6.980
                                                          1.00
                                                                 0.00
        603
             OP1 THY
                                 -3.229 -36.378
                                                          1.00
ATOM
                         69
                                                   8.001
                                                                 0.00
             OP2 THY
                                 -2.463 -38.080
ATOM
        604
                         69
                                                   6.246
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        605
             05'
                 THY
                         69
                                 -4.518 -36.722
                                                   5.886
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             C5' THY
                                 -5.271 -37.513
                                                          1.00
        606
                         69
                                                   4.982
                                                                 0.00
             C4'
                 THY
                                 -6.378 -36.681
ATOM
        607
                         69
                                                   4.331 1.00
                                                                0.00
        608
             04'
                 THY
                                 -7.409 -36.225
ATOM
                         69
                                                   5.172 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        609
             C1'
                 THY
                                 -8.040 -35.134
                                                          1.00
                         69
                                                    4.545
                                                                 0.00
ATOM
        610
             N1
                  THY
                         69
                                  -8.883 -34.424
                                                    5.541
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C6
                 THY
ATOM
        611
                         69
                                  -8.432 -34.261
                                                    6.830 1.00
                                                                0.00
                 THY
ATOM
        612
             C5
                         69
                                  -9.207 -33.674
                                                   7.776 1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
        613
             C7
                         69
                                  -8.591 -33.504
                                                   9.153
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C4
                  THY
                                 -10.553 -33.228
ATOM
        614
                         69
                                                    7.480
                                                           1.00
                                                                 0.00
             04
                  THY
                                 -11.331 -32.708
ATOM
        615
                         69
                                                    8.275
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N3
                 THY
                                 -10.936 -33.437
ATOM
        616
                         69
                                                    6.167
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
             C2
                                 -10.157 -34.000
        617
                         69
                                                    5.167
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             02
                 THY
                                 -10.594 -34.099
        618
                         69
                                                    4.023
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C3'
                 THY
ATOM
        619
                                  -5.860 -35.427
                                                           1.00
                         69
                                                    3.617
                                                                 0.00
             C2' THY
ATOM
        620
                         69
                                  -6.818 -34.340
                                                    4.107
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        621
             03' THY
                                  -5.853 -35.620
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         69
                                                    2.213
ATOM
        622
             P
                  THY
                         70
                                  -5.074 -34.614
                                                    1.218
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OP1 THY
ATOM
        623
                         70
                                  -3.998 -33.950
                                                    1.989
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OP2 THY
ATOM
         624
                         70
                                  -4.716 -35.371
                                                   -0.006
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             05' THY
         625
                         70
                                  -6.173 -33.495
                                                    0.863 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         626
              C5'
                 THY
                                  -7.275 -33.763
                         70
                                                    0.015
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         627
              C4'
                  THY
                         70
                                  -8.351 -32.680
                                                    0.185
                                                          1.00
                                                                 0.00
              04'
                  THY
ATOM
         628
                         70
                                  -8.797 -32.633
                                                    1.525 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         629
              C1' THY
                         70
                                  -9.482 -31.413
                                                    1.696
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         630
              N1
                  THY
                                  -9.672 -31.105
                                                           1.00
                         70
                                                    3.137
                                                                 0.00
ATOM
         631
              C6
                  THY
                         70
                                  -8.607 -31.193
                                                    3.999
                                                           1.00
                                                                 0.00
         632
              C5
                  THY
                                  -8.738 -30.879
ATOM
                         70
                                                    5.310 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         633
              C7
                  THY
                         70
                                  -7.478 -30.994
                                                    6.140 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         634
              C4
                  THY
                         70
                                 -10.005 -30.452
                                                    5.867
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         635
              04
                  THY
                                 -10.195 -30.104
                         70
                                                    7.029
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              N3
                  THY
                                 -11.049 -30.464
         636
                         70
                                                    4.956
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C2
                  THY
                         70
                                 -10.937 -30.728
         637
                                                    3.599
                                                           1.00
                                                                 0.00
              02
                  THY
ATOM
         638
                         70
                                 -11.912 -30.598
                                                    2.864
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C3'
                  THY
         639
                         70
                                  -7.871 -31.250
                                                   -0.100
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         640
              C2'
                  THY
                          70
                                  -8.560 -30.416
                                                    0.991
                                                           1.00
                                                                 0.00
              03'
                  THY
ATOM
         641
                         70
                                  -8.235 -30.857
                                                  -1.412
                                                          1.00
                                                                 0.00
         642
              P
                  ADE
                                  -7.768 -29.444
ATOM
                          71
                                                   -2.040
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         643
              OP1 ADE
                                  -7.924 -29.512
                         71
                                                  -3.508
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         644
              OP2 ADE
                         71
                                  -6.459 - 29.084
                                                  -1.452
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         645
              05' ADE
                          71
                                  -8.844 -28.404
                                                   -1.459
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C5' ADE
ATOM
         646
                          71
                                 -10.183 -28.369
                                                  -1.909
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C4' ADE
         647
                          71
                                 -10.974 -27.357
                                                  -1.069
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         648
             04' ADE
                          71
                                 -11.228 -27.865
                                                   0.241 1.00 0.00
```

	277							278
ATOM	649	C1'	ADE	71	-11.057 -26.805	1.157	1.00	0.00
ATOM	650	N9	ADE	71	-10.859 -27.212	2.568	1.00	0.00
ATOM	651	С8	ADE	71	-9.717 -27.715	3.128	1.00	0.00
ATOM	652	N7	ADE	71	-9.699 -27.738	4.428	1.00	0.00
ATOM	653	C5	ADE	71	-10.946 -27.239		1.00	0.00
ATOM	654	C6	ADE	71	-11.550 -26.981	6.002	1.00	0.00
ATOM	655	N6	ADE	71	-10.914 -27.225		1.00	0.00
ATOM	656	N1	ADE	71	-12.782 -26.441		1.00	0.00
ATOM	657	C2	ADE	71	-13.390 -26.195		1.00	0.00
ATOM	658	N3	ADE	71	-12.926 -26.388		1.00	0.00
ATOM	659	C4	ADE	71	-11.676 -26.927		1.00	0.00
ATOM	660	C3'	ADE	71	-10.200 -26.036		1.00	0.00
ATOM	661	C2'	ADE	71	-9.772 -26.219		1.00	0.00
ATOM	662	03'	ADE	71	-11.096 -24.955		1.00	0.00
ATOM	663	P	GUA	72	-10.643`-23.408		1.00	0.00
ATOM	664	0P1	GUA	72	-9.519 -23.123		1.00	0.00
ATOM	665		GUA	72	-10.547 -23.029		1.00	0.00
ATOM	666	05'	GUA	72	-11.941 -22.723	-0.479	1.00	0.00
ATOM	667	C5'	GUA	72	-13.252 -22.987	-0.946	1.00	0.00
ATOM	668	C4'	GUA	72	-14.247 -22.652	0.169	1.00	0.00
ATOM	669	04'	GUA	72	-13.939 -23.414	1.332	1.00	0.00
ATOM	670	C1'	GUA	72	-13.695 -22.568	2.442	1.00	0.00
ATOM	671	N9	GUA	72	-12.592 -23.101	3.278	1.00	0.00
ATOM	672	C8	GUA	72	-11.374 -23.567	2.862	1.00	0.00
ATOM	673	N7	GUA	72	-10.545 -23.880	3.822	1.00	0.00
ATOM	674	C5	GUA	72	-11.285 -23.618	4.972	1.00	0.00
ATOM	675	C6	GUA	72	-10.934 -23.783	6.345	1.00	0.00
ATOM	676	06	GUA	72	-9.868 -24.201		1.00	0.00
ATOM	677	N1	GUA	72	-11.962 -23.415		1.00	0.00
ATOM	678	C2	GUA	72	-13.194 -22.942		1.00	0.00
ATOM	679	N2	GUA	72	-14.059 -22.542		1.00	0.00
ATOM	680	N3	GUA	72	-13.523 -22.783		1.00	0.00
ATOM	681	C4	GUA	72	-12.535 -23.142		1.00	0.00
ATOM	682	C3'		72	-14.167 -21.181		1.00	0.00
ATOM	683	C2'		72	-13.257 -21.258		1.00	0.00
ATOM	684	03'	GUA	72 72	-15.468 -20.713		1.00	0.00
ATOM	685	P	GUA	73	-15.776 -19.152		1.00	0.00
ATOM	686		GUA	73	-17.203 -18.907		1.00	0.00
ATOM	687		CUA	73	-14.732 -18.344		1.00	0.00
ATOM	688	05' C5'		73 72	-15.572 -19.023 -16.526 -19.547		1.00	0.00
ATOM ATOM	689 690	C4'		73 73	-16.326 -19.347 -16.074 -19.296		1.00	0.00
ATOM	691	04'		73	-10.074 -19.290 -14.845 -19.950		1.00	0.00
ATOM	692	C1'		73 73	-14.129 -19.202		1.00	0.00
ATOM	693	N9	GUA	73	-14.129 -19.202 -12.704 -19.594		1.00	0.00
ATOM	694	C8	GUA	73	-11.897 -19.713		1.00	0.00
ATOM	695	N7	GUA	73	-10.719 -20.214		1.00	0.00
ATOM	696	C5	GUA	73	-10.732 -20.411		1.00	0.00
ATOM	697	C6	GUA	73	-9.719 -20.927		1.00	0.00
ATOM	698	06	GUA	73	-8.600 -21.317		1.00	0.00
						-		

```
279
                                                                   280
ATOM
        699
             N1
                 GUA
                         73
                                                   8.948 1.00 0.00
                                -10.114 - 20.964
             C2
                  GUA
        700
                         73
                                -11.347 -20.543
                                                   9.406
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
                  GUA
ATOM
        701
             N2
                         73
                                -11.568 -20.561
                                                  10.723
                                                          1.00
                                                                 0.00
            N3
                  GUA
ATOM
        702
                         73
                                -12.303 - 20.064
                                                   8.601
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C4
                  GUA
ATOM
        703
                         73
                                -11.936 -20.021
                                                   7.293 1.00
                                                                 0.00
        704 C3'
                  GUA
ATOM
                         73
                                -15.834 -17.808
                                                   5.398 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        705
            C2'
                  GUA
                         73
                                -14.350 -17.782
                                                   5.783 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        706
             03'
                 GUA
                         73
                                -16.716 -17.432
                                                   6.442 1.00
                                                                 0.00
        707
             P
                  GUA
                                                   7.013
ATOM
                         74
                                -16.797 -15.925
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OP1 GUA
ATOM
        708
                         74
                                -18.136 -15.722
                                                   7.607
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OP2 GUA
ATOM
        709
                         74
                                 -16.296 -14.990
                                                   5.981
                                                          1.00
                                                                 0.00
             05'
                  GUA
ATOM
        710
                         74
                                                   8.202 1.00
                                -15.718 -15.993
                                                                 0.00
             C5'
                  GUA
ATOM
        711
                         74
                                 -15.954 - 16.779
                                                   9.353
                                                          1.00
                                                                 0.00
        712 C4'
                  GUA
ATOM
                         74
                                 -14.720 -16.769
                                                   10.254
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        713
             04'
                  GUA
                         74
                                 -13.606 -17.345
                                                   9.599
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  GUA
ATOM
        714 C1'
                         74
                                                  10.191
                                 -12.442 -16.814
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        715 N9
                  GUA
                         74
                                 -11.267 -17.061
                                                   9.326
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  GUA
ATOM
        716 C8
                         74
                                                   7.976
                                                          1.00
                                 -11.154 -16.847
                                                                 0.00
ATOM
        717 N7
                  GUA
                         74
                                 -10.009 -17.208
                                                   7.470
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C5
                  GUA
ATOM
        718
                         74
                                 -9.304 -17.702
                                                   8.562
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        719 C6
                  GUA
                         74
                                  -7.996 -18.271
                                                   8.631 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        720
             06
                  GUA
                         74
                                  -7.189 -18.427
                                                   7.718
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        721
             N1
                  GUA
                         74
                                  -7.660 -18.686
                                                   9.914
                                                          1.00
                                                                 0.00
        722 C2
                  GUA
ATOM
                         74
                                  -8.481 -18.554
                                                  11.015
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        723
             N2
                  GUA
                         74
                                  -7.993 -18.938
                                                  12.196
                                                          1.00
                                                                 0.00
        724
             N3
                  GUA
                                                  10.956
ATOM
                         74
                                  -9.704 -18.010
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        725
             C4
                  GUA
                         74
                                 -10.063 -17.613
                                                   9.705
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        726
              C3'
                  GUA
                         74
                                 -14.276 -15.354
                                                  10.659
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        727
             C2'
                  GUA
                         74
                                 -12.803 -15.334
                                                  10.235
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        728
              03'
                  GUA
                         74
                                 -14.492 -15.203
                                                  12.050
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         729
              P
                  THY
                         75
                                 -14.136 -13.847
                                                  12.846
                                                          1.00
                                                                 0.00
              0P1
                  THY
ATOM
         730
                         75
                                 -14.004 -12.737
                                                  11.877
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         731
              OP2 THY
                         75
                                 -15.063 -13.723
                                                  13.992
                                                           1.00
                                                                 0.00
              05'
                  THY
ATOM
         732
                         75
                                 -12.678 -14.201
                                                  13.415
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         733
              C5'
                  THY
                         75
                                 -12.506 - 15.249
                                                  14.349
                                                          1.00
                                                                 0.00
              C4'
                  THY
ATOM
         734
                         75
                                 -11.017 -15.486
                                                  14.588
                                                           1.00
                                                                 0.00
         735
              04'
                  THY
                         75
ATOM
                                 -10.360 -15.768
                                                  13.366
                                                          1.00
                                                                 0.00
         736
              C1'
                  THY
                         75
                                                   13.505
ATOM
                                  -9.010 -15.389
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         737
              N1
                  THY
                         75
                                  -8.352 -15.259
                                                  12.176
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
         738
              60
                         75
                                  -9.007 -14.639
                                                   11.136
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         739
              C5
                  THY
                         75
                                                    9.899
                                  -8.456 -14.572
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         740
             C7
                  THY
                         75
                                  -9.281 -13.863
                                                    8.840
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
         741
              C4
                         75
                                  -7.158 -15.150
                                                    9.615
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
         742
              04
                         75
                                  -6.608 -15.188
                                                    8.517
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         743
              N3
                  THY
                                  -6.547 -15.714
                                                   10.719
                                                           1.00
                         75
                                                                 0.00
         744
              C2
                  THY
                         75
                                  -7.076 -15.796
                                                   11.997
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
         745
              02
                  THY
                         75
                                  -6.430 -16.324
                                                   12.898
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         746
              C3'
                  THY
                         75
                                 -10.301 -14.263
                                                  15.183
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C2'
                  THY
ATOM
         747
                         75
                                  -9.156 -14.038
                                                   14.192
                                                           1.00
                                                                 0.00
              03' THY
ATOM
         748
                         75
                                  -9.884 -14.593 16.497 1.00
                                                                0.00
```

```
281
                                                                   282
ATOM
        749
             P
                         76
                                 -8.976 -13.621 17.411 1.00 0.00
                 THY
             OP1 THY
                         76
                                 -9.401 -13.772
                                                  18.819
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        750
             OP2 THY
                         76
                                 -8.920 -12.277
                                                  16.790
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        751
        752
             05'
                 THY
                         76
                                 -7.535 -14.314
                                                  17.240
                                                                 0.00
ATOM
                                                          1.00
             C5'
ATOM
        753
                 THY
                         76
                                 -7.335 -15.664
                                                  17.613
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        754
             C4'
                 THY
                         76
                                 -5.913 -16.102 17.260
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 THY
                                 -5.679 -15.845
ATOM
        755
             04'
                         76
                                                 15.887
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 THY
                                 -4.474 -15.132 15.713
ATOM
        756
             C1'
                         76
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  THY
                                 -4.592 -14.294 14.483
                                                          1.00
ATOM
        757 N1
                         76
                                                                 0.00
        758
             60
                 THY
                         76
                                 -5.542 -13.300
                                                  14.401
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
                  THY
                         76
                                 -5.794 -12.656
                                                  13.233
                                                          1.00
                                                                 0.00
        759
             C5
ATOM
        760
             C7
                  THY
                         76
                                 -6.851 -11.566
                                                  13.252
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        761
             C4
                  THY
                         76
                                 -5.088 -12.994
                                                  12.016
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        762
             04
                  THY
                         76
                                 -5.288 -12.499
                                                  10.909
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                  -4.129 -13.975 12.182
ATOM
        763
             N3
                  THY
                         76
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        764
             C2
                  THY
                         76
                                 -3.837 -14.642
                                                  13.361
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
                                                  13.378
ATOM
        765
             02
                         76
                                  -2.944 -15.487
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        766
             C3'
                  THY
                         76
                                  -4.845 -15.332
                                                  18.047
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C2'
                 THY
                                  -4.330 -14.332
ATOM
         767
                         76
                                                  17.012
                                                          1.00
                                                                 0.00
             03'
                  THY
                                  -3.854 -16.246
ATOM
         768
                         76
                                                   18.480
                                                           1.00
                                                                 0.00
             P
                                  -2.662 -15.812
                                                  19.477
ATOM
         769
                  ADE
                         77
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP1 ADE
                                  -3.039 -14.553
                                                  20.155
                                                                 0.00
ATOM
         770
                         77
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         771
              OP2 ADE
                         77
                                  -2.271 -16.995
                                                  20.274
                                                          1.00
ATOM
         772
              05'
                  ADE
                         77
                                  -1.480 -15.491
                                                   18.438
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         773
              C5'
                  ADE
                         77
                                  -0.777 - 16.538
                                                   17.803
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         774
              C4'
                  ADE
                         77
                                   0.202 - 15.959
                                                   16.784
                                                           1.00
                                                                 0.00
        775
              04'
                  ADE
                                  -0.496 -15.291
                                                  15.749
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         77
              C1'
                  ADE
                                   0.305 - 14.232
                                                   15.282
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         776
                         77
         777
              N9
                  ADE
                                  -0.518 -13.284
                                                   14.495
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         77
                  ADE
                                  -1.645 -12.604
                                                   14.891
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         778
              С8
                         77
              N7
                  ADE
                                  -2.239 -11.942
                                                   13.939
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         779
                          77
ATOM
              C5
                  ADE
                                  -1.428 -12.169
                                                   12.834
                                                           1.00
                                                                  0.00
         780
                          77
ATOM
              60
                  ADE
                          77
                                  -1.496 -11.736
                                                  11.496
                                                           1.00
                                                                 0.00
         781
ATOM
         782
              N6
                  ADE
                          77
                                  -2.498 -10.979
                                                   11.045
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              N1
                  ADE
                          77
                                  -0.519 -12.103
                                                   10.644
                                                           1.00
                                                                  0.00
         783
              C2
                  ADE
                                   0.461 - 12.880
                                                   11.099
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         784
                          77
                  ADE
ATOM
         785
              N3
                          77
                                   0.616 - 13.393
                                                   12.319
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         786
              C4
                  ADE
                          77
                                  -0.367 -12.973
                                                   13.162
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C3'
                  ADE
                                   1.163 -14.922
                                                  17.384
ATOM
         787
                          77
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         788
              C2' ADE
                          77
                                   0.793 - 13.653
                                                   16.605
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         789
              03'
                  ADE
                          77
                                   2.495 -15.372
                                                   17.184
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         790
              P
                  GUA
                                   3.747 -14.553
                                                   17.769
                                                           1.00
                                                                  0.00
              OP1 GUA
                                   3.312 -13.780
                                                   18.950
ATOM
         791
                          78
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         792
              OP2 GUA
                          78
                                   4.937 -15.429
                                                   17.873
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         793
              05'
                  GUA
                                    4.026 -13.510
                                                   16.600
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          78
              C5'
                  GUA
                                   4.791 -13.837
 ATOM
         794
                          78
                                                   15.461
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
              C4'
                  GUA
                                   5.004 -12.544
                                                   14.680
                                                                  0.00
         795
                          78
                                                           1.00
              04'
                  GUA
                                   3.776 -12.080
         796
                          78
                                                   14.170
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
 ATOM
              C1'
                  GUA
                                   3.896 -10.692
                                                   13.971
         797
                          78
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         798
              N9
                  GUA
                          78
                                   2.543 -10.133 13.773 1.00 0.00
```

					(143)				特開 Z U
	283								284
ATOM	799	C8	GUA	78		-10.266	14.566	1.00	0.00
ATOM	800	N7	GUA	78	0.337	-9.801	14.031	1.00	0.00
ATOM	801	C5	GUA	78	0.748	-9.316	12.795	1.00	0.00
ATOM	802	C6	GUA	78	0.005	-8.684	11.752	1.00	0.00
ATOM	803	06	GUA	78	-1.195	-8.419	11.728	1.00	0.00
ATOM	804	N1	GUA	78	0.804	-8.335	10.667	1.00	0.00
ATOM	805	C2	GUA	78	2.164	-8.558	10.595	1.00	0.00
ATOM	806	N2	GUA	78	2.820	-8.142	9.511	1.00	0.00
ATOM	807	N3	GUA	78	2.863	-9.153	11.570	1.00	0.00
ATOM	808	C4	GUA	78	2.100	-9.504	12.637	1.00	0.00
ATOM	809	C3'	GUA	78	5.522	-11.402	15.572	1.00	0.00
ATOM	810	C2'	GUA	78	4.574	-10.239	15.259	1.00	0.00
ATOM	811	03'	GUA	78	6.891	-11.186	15.281	1.00	0.00
ATOM	812	P	GUA	79	7.825	-10.244	16.197	1.00	0.00
ATOM	813	0P1	GUA	79	9.232	-10.617	15.943	1.00	0.00
ATOM	814	0P2	GUA	79	7.299	-10.291	17.584	1.00	0.00
ATOM	815	05'	GUA	79 -	7.548	-8.799	15.543	1.00	0.00
ATOM	816	C5'	GUA	79	8.052	-8.495	14.252	1.00	0.00
ATOM	817	C4'	GUA	79	7.361	-7.278	13.632	1.00	0.00
ATOM	818	04'	GUA	79	5.968	-7.481	13.503	1.00	0.00
ATOM	819	C1'	GUA	79	5.363	-6.217	13.351	1.00	0.00
ATOM	820	N9	GUA	79	3.908	-6.312	13.622	1.00	0.00
ATOM	821	C8	GUA	79	3.304	-6.873	14.717	1.00	0.00
ATOM	822	N7	GUA	79	2.005	-6.808	14.707	1.00	0.00
ATOM	823	C5	GUA	79	1.716	-6.171	13.507	1.00	0.00
ATOM	824	C6	GUA	79	0.452	-5.832	12.938	1.00	0.00
ATOM	825	06	GUA	79	-0.663	-5.981	13.430	1.00	0.00
ATOM	826	N1	GUA	79	0.568	-5.278	11.669	1.00	0.00
ATOM	827	C2	GUA	79	1.768	-5.040	11.032	1.00	0.00
ATOM	828	N2	GUA	79	1.711	-4.508	9.809	1.00	0.00
ATOM	829	· N3	GUA	79	2.963	-5.316	11.582	1.00	0.00
ATOM	830	C4	GUA	79	2.871	-5.889	12.816	1.00	0.00
ATOM	831	C3'	GUA	79	7.517	-5.984	14.443	1.00	0.00
ATOM	832	C2'	GUA	79	6.094	-5.408	14.420	1.00	0.00
ATOM	833	03'	GUA	79	8.492	-5.172	13.807	1.00	0.00
ATOM	834	P	GUA	80	8.912	-3.707	14.346	1.00	0.00
ATOM	835	0P1	GUA	80	10.271	-3.402	13.848	1.00	0.00
ATOM	836	0P2	GUA	80	8.618	-3.626	15.793	1.00	0.00
ATOM	837	05'	GUA	80	7.872	-2.759	13.565	1.00	0.00
ATOM	838	C5'	GUA	80	7.892	-2.668	12.154	1.00	0.00
ATOM	839	C4'	GUA	80	6.643	-1.938	11.658	1.00	0.00
ATOM	840	04'	GUA	80	5.479	-2.621	12.093	1.00	0.00
ATOM	841	C1'	GUA	80	4.488	-1.661	12.375	1.00	0.00
ATOM	842	N9	GUA	80	3.419	-2.227	13.223	1.00	0.00
ATOM	843	C8	GUA	80	3.527	-2.804	14.461	1.00	0.00
ATOM	844	N7	GUA	80	2.389	-3.145	14.996	1.00	0.00
ATOM	845	C5	GUA	80	1.451	-2.778	14.038	1.00	0.00
ATOM	846	C6	GUA	80	0.028	-2.886	14.055	1.00	0.00
ATOM	847	06	GUA		-0.690	-3.316	14.956	1.00	0.00
ATOM	848	N1	GUA	80	-0.550	-2.440	12.873	1.00	0.00

	005				(111)				2000
ATOM	285	00	CIIA	00	0.150	1 000	11 001	1 00	286
ATOM	849	C2	GUA	80	0.153	-1.928	11.801	1.00	0.00
ATOM	850	N2	GUA	80	-0.544	-1.532	10.735	1.00	0.00
ATOM	851	N3	GUA	80	1.486	-1.794	11.795	1.00	0.00
ATOM	852	C4	GUA	80	2.075	-2.240	12.937	1.00	0.00
ATOM	853	C3'	GUA	80	6.521	-0.505	12.204	1.00	0.00
ATOM	854	C2'	GUA	80	5.301	-0.600	13.114	1.00	0.00
ATOM	855	03'	GUA	80	6.259	0.402	11.153	1.00	0.00
ATOM	856	05'	CYT	81	-9.611	0.653	12.362	1.00	0.00
ATOM	857	C5'	CYT	81	-8.900	1.554	11.540	1.00	0.00
ATOM	858	C4'	CYT	81	-7.623	0.897	11.008	1.00	0.00
ATOM	859	04'	CYT	81	-6.838	0.380	12.059	1.00	0.00
ATOM	860	C1'	CYT	81	-5.914	-0.508	11.470	1.00	0.00
ATOM	861	N1	CYT	81	-5.295	-1.392	12.486	1.00	0.00
ATOM	862	60	CYT	81	-6.072	-1.996	13.442	1.00	0.00
ATOM	863	C5	CYT	81	-5.543	-2.845	14.351	1.00	0.00
ATOM	864	C4	CYT	81	-4.127	-3.070	14.282	1.00	0.00
ATOM	865	N4	CYT	81	-3.526	-3.878	15.158	1.00	0.00
ATOM	866	N3	CYT	81	-3.379	-2.493	13.334	1.00	0.00
ATOM	867	C2	CYT	81	-3.931	-1.664	12.406	1.00	0.00
ATOM	868	02	CYT	81	-3.229	-1.189	11.517	1.00	0.00
ATOM	869	C3'	CYT	81	-7.877	-0.314	10.098	1.00	0.00
ATOM	870	C2'	CYT	81	-6.796	-1.312	10.523	1.00	0.00
ATOM	871	03'	CYT	81	-7.777	0.101	8.747	1.00	0.00
ATOM	872	P	CYT	82	-8.012	-0.908	7.510	1.00	0.00
ATOM	873		CYT	82	-8.756	-2.086	8.009	1.00	0.00
ATOM	874		CYT	82	-8.547	-0.125	6.376	1.00	0.00
ATOM	875	05'		82	-6.512	-1.380	7.145	1.00	0.00
ATOM	876	C5'	CYT	82	-5.591	-0.501	6.523	1.00	0.00
ATOM	877	C4'	CYT	82	-4.271	-1.224		1.00	0.00
ATOM	878	04'	CYT	82	-3.677	-1.665	7.427	1.00	0.00
ATOM	879	C1'	CYT	82	-3.072	-2.930	7.248		0.00
ATOM	880	N1	CYT	82	-3.098	-3.615	8.566	1.00	0.00
ATOM	881	C6	CYT	82	-4.294	-3.719	9.227	1.00	0.00
ATOM	882	C5	CYT	82	-4.394	-4.284	10.444	1.00	0.00
ATOM	883	C4	CYT	82	-3.179	-4.779	11.027	1.00	0.00
ATOM	884	N4	CYT	82	-3.220	-5.440	12.185	1.00	0.00
ATOM	885	N3	CYT	82	-1.998	-4.631	10.408	1.00	0.00
ATOM	886	C2	CYT	82	-1.917	-4.050	9.174	1.00	0.00
ATOM	887	02	CYT	82	-0.824	-3.929	8.623	1.00	0.00
ATOM	888	C3'		82	-4.468	-2.470	5.347	1.00	0.00
ATOM	889	C2'		82	-3.995	-3.619	6.238	1.00	0.00
ATOM	890	03'		. 82	-3.715	-2.316	4.154	1.00	0.00
ATOM	891	P	CYT	83	-3.887	-3.302	2.887	1.00	0.00
ATOM	892		CYT	83	-5.187	-3.999	2.999	1.00	0.00
ATOM	893		CYT	83	-3.562	-2.540	1.660	1.00	0.00
ATOM	894	05'		83	-2.720	-4.379	3.136	1.00	0.00
ATOM	895	C5'		83	-1.395	-4.153	2.692	1.00	0.00
ATOM	896	C4'		83	-0.468	-5.212	3.296	1.00	0.00
ATOM	897	04		83	-0.551	-5.141	4.705	1.00	0.00
ATOM	898		CYT	83	-0.088			1.00	0.00
VIOW	030	C1	011	oo	0.000	0.332	3.203	1.00	0.00

287 288 6.452 1.00 0.00 ATOM 899 N1 CYT 83 -0.913 -6.687ATOM 900 C6 CYT 83 -2.278-6.696 6.345 1.00 0.00 C5 CYT -3.074 -6.9787.399 ATOM 901 83 1.00 0.00ATOM 902 C4 CYT 83 -2.418 -7.325 8.627 1.00 0.00 -3.131 -7.674 ATOM 903 N4 CYT 83 9.699 1.00 0.00 ATOM 904 N3 CYT 83 -1.082 -7.3218.727 1.00 0.00 ATOM 905 C2 CYT -0.300 -6.9897.662 1.00 83 0.00 ATOM 906 02 CYT 83 0.922 -6.9677.783 1.00 0.00 C3' CYT ATOM 907 83 -0.895-6.6472.982 1.00 0.00 C2' CYT -0.298 **ATOM** 908 83 -7.4014.170 1.00 0.00 ATOM 03' CYT -0.389-7.093909 83 1.735 1.00 0.00 **ATOM** 910 P THY 84 -0.738 -8.5581.137 1.00 0.00 ATOM OP1 THY -0.356-8.577 911 84 -0.2921.00 0.00 ATOM 912 OP2 THY 84 -2.120 -8.9141.532 1.00 0.00**ATOM** 913 05' THY 0.260 -9.541 1.00 84 1.931 0.00 C5' ATOM 914 THY 84 1.665 -9.433 1.803 1.00 0.00 THY ATOM 915 C4' 84 2.347 - 10.4362.741 1.00 0.00 ATOM 916 04' THY 84 1.809 -10.300 4.048 1.00 0.00 THY ATOM 917 C1' 84 1.416 - 11.5584.560 1.00 0.00 N1 THY ATOM-918 84 0.280 - 11.3765.514 1.00 0.00 ATOM 919 C6 THY -0.915 -10.8495.076 1.00 84 0.00 THY ٠.. ATOM 920 C5 84 -1.930 -10.5915.936 1.00 0.00 C7 THY ATOM 921 84 -3.212 -10.058 5.320 1.00 0.00 C4ATOM THY 922 84 -1.801 -10.834 1.00 0.00 7.358 THY ATOM 923 04 84 -2.656 -10.5908.202 1.00 0.00 ATOM 924 N3 THY -0.586 -11.389 1.00 84 7.728 0.00 ATOM 925 C2THY 0.472 - 11.6711.00 84 6.869 0.00 **ATOM** 926 02 THY 84 1.509 -12.153 7.316 1.00 0.00 ATOM 927 C3' THY 84 2.113 -11.891 2.312 1.00 0.00 ATOM 928 C2' THY 1.039 -12.347 84 3.302 1.00 0.00 ATOM 929 03' THY 84 3.331 -12.611 2.404 1.00 0.00 930 P ADE ATOM 85 3.484 -14.128 1.864 1.00 0.00 OP1 ADE ATOM 931 85 2.534 -14.346 0.752 1.00 0.00 OP2 ADE ATOM 932 4.923 -14.410 1.669 1.00 0.00 85 05' ADE 2.980 -14.969 ATOM 933 85 3.136 1.00 0.00 **ATOM** 934 C5' ADE 3.740 -14.978 85 4.325 1.00 0.00 ATOM 935 C4' ADE 85 2.926 -15.552 5.481 1.00 0.00 04' **ATOM** 936 ADE 1.774 -14.785 1.00 85 5.766 0.00 937 C1' ADE ATOM 85 0.860 - 15.6676.370 1.00 0.00 ATOM 938 N9 ADE 85 -0.472 -15.053 6.503 1.00 0.00 **ATOM** 939 68 ADE 0.00 85 -1.256 - 14.4765.539 1.00 **ATOM** 940 N7 ADE 85 -2.365 -13.959 5.990 1.00 0.00 ADE ATOM 941 С5 85 -2.311 -14.214 7.356 1.00 0.00 ATOM 942 C6 ADE 85 -3.168 -13.905 8.432 1.00 0.00 ATOM 943 N6 ADE -4.305 -13.221 8.286 1.00 0.00 85 ADE ATOM 944 N1 85 -2.814 -14.301 9.669 1.00 0.00 ATOM C2ADE -1.670 -14.954 945 85 9.834 1.00 0.00 ATOM 946 N3 ADE 85 -0.774 -15.296 8.919 1.00 0.00 ATOM 947 C4 ADE 85 -1.161 -14.888 7.679 1.00 0.00 ATOM 948 C3' ADE 85 2.419 - 16.9875.261 1.00 0.00

	200				(110)			000
ATOH	289	ري. دي	ADE	05	0.006 16.006	F 200	1 00	290
ATOM	949	C2'	ADE	85 95	0.906 -16.806	5.360	1.00	0.00
ATOM	950	03'	ADE	85	2.891 -17.741	6.358	1.00	0.00
ATOM	951	P	ADE	86	3.121 -19.324	6.301	1.00	0.00
ATOM	952	0P1		86	4.552 -19.574	5.999	1.00	0.00
ATOM	953		ADE	86	2.077 -19.936	5.454	1.00	0.00
ATOM	954	05'	ADE	86	2.819 -19.728	7.825	1.00	0.00
ATOM	955	C5'	ADE	86	3.526 -19.150	8.903	1.00	0.00
ATOM	956	C4'	ADE	86	2.780 -19.430	10.208	1.00	0.00
ATOM	957	04'	ADE	86	1.574 -18.683	10.218	1.00	0.00
ATOM	958	C1'	ADE	86	0.441 -19.518	10.354	1.00	0.00
ATOM	959	N9	ADE	86	-0.640 -19.020	9.466	1.00	0.00
ATOM	960	C8	ADE	86	-0.653 -18.951	8.093	1.00	0.00
ATOM	961	N7	ADE	86	-1.720 -18.399	7.585	1.00	0.00
ATOM	962	C5	ADE	86	-2.474 -18.069	8.702	1.00	0.00
ATOM	963	C6	ADE	86	-3.720 -17.429	8.859	1.00	0.00
ATOM	964	N6	ADE	86	-4.440 -16.983	7.827	1.00	0.00
ATOM	965	N1	ADE	86	-4.189 -17.237	10.105	1.00	0.00
ATOM	966	C2	ADE	86	-3.464 -17.654	11.137	1.00	0.00
ATOM	967	N3	ADE	86	-2.278 -18.253	11.126	1.00	0.00
ATOM	968	C4	ADE	86	-1.825 -18.436	9.856	1.00	0.00
ATOM	969	C3'	ADE	86	2.395 -20.904	10.388	1.00	0.00
ATOM	970	C2'	ADE	86	0.927 -20.913	9.958	1.00	0.00
ATOM	971	03'	ADE	86	2.625 -21.259	11.739	1.00	0.00
ATOM	972	P	CYT	87	2.414 -22.755	12.300	1.00	0.00
ATOM	973	0P1	CYT	87	2.577 -23.719	11.184	1.00	0.00
ATOM	974	0P2	CYT	87	3.237 -22.898	13.522	1.00	0.00
ATOM	975	05'	CYT	87	0.867 -22.691	12.732	1.00	0.00
ATOM	976	C5'	CYT	87	0.470 -21.860	13.805	1.00	0.00
ATOM	977	C4'	CYT	87	-1.045 -21.654	13.854	1.00	0.00
ATOM	978	04'	CYT	87	-1.545 -21.117	12.649	1.00	0.00
ATOM	979	C1'	CYT	87	-2.942 -21.320	12.661	1.00	0.00
ATOM	980	N1	CYT	87	-3.537 -21.168	11.308	1.00	0.00
ATOM	981	C6	CYT	87	-2.880 -21.652	10.203	1.00	0.00
ATOM	982	C5	CYT	87	-3.368 -21.462	8.953	1.00	0.00
ATOM	983	C4	CYT	87	-4.600 -20.735	8.840	1.00	0.00
ATOM	984	N4	CYT	87	-5.099 -20.435	7.642	1.00	0.00
ATOM	985	N3	CYT	87	-5.258 -20.305	9.924	1.00	0.00
ATOM	986	C2	CYT	87	-4.770 -20.528	11.174	1.00	0.00
ATOM	987	02	CYT	87	-5.413 -20.148	12.152	1.00	0.00
ATOM	988	C3'	CYT	87	-1.838 -22.944	14.071	1.00	0.00
ATOM	989	C2'	CYT	87	-3.039 -22.761	13.139	1.00	0.00
ATOM	990	03'	CYT	87	-2.177 -23.053	15.442	1.00	0.00
ATOM	991	P	CYT	88	-2.955 -24.336	16.040	1.00	0.00
ATOM	992	0P1	CYT	88	-2.666 -24.416	17.488	1.00	0.00
ATOM	993	0P2	CYT	88	-2.686 -25.499	15.164	1.00	0.00
ATOM	994	05'	CYT	88	-4.496 -23.915	15.853	1.00	0.00
ATOM	995	C5'	CYT	88	-5.064 -22.854	16.597	1.00	0.00
ATOM	996	C4'	CYT	88	-6.462 -22.534	16.061	1.00	0.00
ATOM	997	04'	CYT	88	-6.389 -22.187	14.694	1.00	0.00
ATOM	998	C1'	CYT	88	-7.604 -22.538	14.073	1.00	0.00

```
291
                                                                   292
ATOM
        999 N1
                                 -7.385 -22.718 12.620 1.00 0.00
                 CYT
                         88
ATOM
       1000
             6
                 CYT
                         88
                                 -6.313 -23.453
                                                 12.189
                                                          1.00
                                                                0.00
                 CYT
ATOM
       1001
             C5
                         88
                                 -6.057 -23.642
                                                 10.881
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1002
             C4
                 CYT
                         88
                                 -6.972 -23.036
                                                   9.952
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1003
             N4
                 CYT
                         88
                                 -6.801 -23.140
                                                  8.637
                                                          1.00
                                                                0.00
             N3
                 CYT
                                 -8.052 -22.367
ATOM
       1004
                         88
                                                  10.381
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
       1005
             C2
                 CYT
                         88
                                 -8.300 -22.203
                                                 11.710
                                                         1.00
                                                                0.00
             02
                 CYT
                                 -9.321 -21.628
ATOM
       1006
                         88
                                                 12.075
                                                         1.00
                                                                0.00
             C3' CYT
ATOM
       1007
                         88
                                 -7.428 -23.728
                                                 16.138
                                                         1.00
                                                                0.00
             C2' CYT
ATOM
       1008
                         88
                                 -7.915 -23.888
                                                 14.703
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             03' CYT
       1009
                         88
                                 -8.460 -23.413
                                                 17.058
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1010 P
                 CYT
                         89
                                 -9.711 -24.392
                                                 17.349
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1011
             OP1 CYT
                                -10.213 -24.107
                                                 18.711
                         89
                                                          1.00
                                                                0.00
                                                                0.00
ATOM
       1012 OP2 CYT
                         89
                                 -9.325 -25.772
                                                 16.979
                                                          1.00
             05' CYT
ATOM
       1013
                                -10.815 -23.882
                                                  16.289
                                                          1.00
                                                                0.00
                         89
             C5' CYT
ATOM
       1014
                         89
                                -11.391 -22.591
                                                  16.384
                                                          1.00
                                                                0.00
             C4' CYT
ATOM
       1015
                         89
                                -12.418 - 22.389
                                                  15.264
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1016
             04' CYT
                         89
                                -11.787 -22.521
                                                  14.006
                                                          1.00
                                                                0.00
             C1' CYT
ATOM
       1017
                         89
                                -12.657 -23.140
                                                  13.082
                                                          1.00
                                                                0.00
             N1
                 CYT
ATOM
       1018
                         89
                                -11.829 -23.868
                                                  12.090
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             C6
                 CYT
       1019
                         89
                                -10.794 - 24.648
                                                  12.531
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1020
             C5
                CYT
                         89
                                 -9.909 -25.206
                                                  11.681
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1021
             C4
                 CYT
                                -10.104 -24.946
                                                                0.00
                         89
                                                  10.283
                                                          1.00
                 CYT
ATOM
       1022
             N4
                         89
                                 -9.253 -25.431
                                                   9.379
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1023
             N3
                 CYT
                                -11.160 -24.242
                                                   9.849
                                                                0.00
                         89
                                                          1.00
             C2 CYT
ATOM
       1024
                         89
                                -12.059 -23.709
                                                  10.727
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1025
             02
                 CYT
                                -13.050 -23.120
                         89
                                                  10.307
                                                          1.00
                                                                0.00
       1026
             C3' CYT
ATOM
                         89
                                -13.544 -23.433
                                                  15.298
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1027
             C2' CYT
                                -13.442 -24.121
                         89
                                                  13.942
                                                          1.00
                                                                0.00
             03' CYT
ATOM
       1028
                         89
                                -14.783 -22.771
                                                  15.502
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1029
             P
                 THY
                                -16.187 -23.560
                                                  15.663
                                                                0.00
                         90
                                                          1.00
             OP1 THY
ATOM
       1030
                         90
                                -15.907 -24.911
                                                  16.197
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1031
             OP2 THY
                         90
                                -17.134 -22.672
                                                  16.371
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1032
             05' THY
                                -16.695 -23.718
                         90
                                                  14.142
                                                         1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1033
             C5' THY
                         90
                                -17.083 -22.593
                                                  13.375
                                                                 0.00
                                                          1.00
ATOM
       1034
             C4'
                 THY
                         90
                                -17.307 -23.001
                                                  11.915
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1035
             04'
                 THY
                         90
                                -16.125 -23.569
                                                  11.389
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1036
             C1' THY
                         90
                                -16.470 - 24.531
                                                  10.418
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1037
              N1
                 THY
                         90
                                -15.315 -25.447
                                                  10.221
                                                          1.00
                                                                 0.00
       1038
                 THY
                                -14.753 -26.074 11.306
ATOM
             C6
                         90
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1039
              C5
                 THY
                         90
                                -13.638 -26.830
                                                  11.184
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 THY
ATOM
       1040
              C7
                                -13.129 -27.509
                         90
                                                  12.443
                                                          1.00
                                                                 0.00
       1041
             C4
                 THY
                         90
                                -12.974 -26.988
ATOM
                                                   9.909
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1042
             04
                 THY
                         90
                                -11.939 -27.624
                                                   9.731
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N3
                 THY
ATOM
       1043
                         90
                                -13.605 -26.344
                                                   8.854
                                                          1.00
                                                                 0.00
       1044
              C2
                 THY
                                -14.785 -25.617
ATOM
                         90
                                                   8.942
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1045
              02
                 THY
                         90
                                -15.321 -25.186
                                                   7.925
                                                                 0.00
                                                          1.00
ATOM
       1046
              C3' THY
                         90
                                -18.405 -24.063
                                                  11.735
                                                          1.00
                                                                 0.00
              C2'
ATOM
        1047
                 THY
                         90
                                -17.662 -25.227
                                                  11.072
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             03' THY
       1048
                         90
                                -19.435 -23.521
                                                 10.924 1.00 0.00
```

11.

```
293
                                                                   294
ATOM
       1049 P
                 ADE
                         91
                                 -20.833 -24.290
                                                  10.665 1.00 0.00
             OP1 ADE
                         91
       1050
                                -21.125 -25.149
                                                  11.834
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1051
             OP2 ADE
                                 -21.829 -23.293
ATOM
                         91
                                                   10.218 1.00
                                                                 0.00
       1052 05' ADE
                         91
                                -20.483 -25.244
ATOM
                                                   9.418 1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1053
             C5'
                 ADE
                         91
                                 -20.358 -24.721
                                                   8.110 1.00
                                                                 0.00
       1054 C4'
                 ADE
                         91
                                -19.788 -25.778
ATOM
                                                   7.161 1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1055
             04'
                 ADE
                         91
                                -18.477 - 26.151
                                                   7.526
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1056
             C1'
                 ADE
                         91
                                 -18.196 -27.350
                                                   6.841
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1057
             N9
                 ADE
                         91
                                 -17.016 -28.006
                                                   7.432
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1058
             68
                 ADE
                         91
                                 -16.761 -28.241
                                                   8.756
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  ADE
ATOM
       1059
             N7
                         91
                                 -15.597 -28.785
                                                   8.991
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C5
                  ADE
                                 -15.051 -28.935
ATOM
       1060
                         91
                                                   7.717
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1061
             C6
                  ADE
                         91
                                -13.822 -29.443
                                                   7.249
                                                           1.00
                                                                 0.00
             N6
                  ADE
                         91
                                 -12.863 -29.878
                                                   8.069
ATOM
       1062
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1063
             N1
                  ADE
                         91
                                 -13.614 -29.507
                                                   5.920
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  ADE
ATOM
       1064
             C2
                         91
                                 -14.565 -29.071
                                                   5.097
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1065
             N3
                  ADE
                         91
                                 -15.740 -28.536
                                                   5.411
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1066
             C4
                  ADE
                         91
                                 -15.923 -28.494
                                                   6.757
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1067
             C3'
                 ADE
                         91
                                 -20.571 -27.100
                                                   7.136
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C2'
                 ADE
ATOM
       1068
                         91
                                 -19.461 - 28.159
                                                   7.097
                                                           1.00
                                                                 0.00
             03'
                  ADE
ATOM
       1069
                         91
                                -21.424 -27.092
                                                   6.004
                                                          1.00
                                                                 0.00
       1070 P
                  ADE
ATOM
                         92
                                -22.353 -28.346
                                                    5.588
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1071
             OP1 ADE
                         92
                                 -23.456 -27.844
                                                    4.739
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1072
             OP2 ADE
                                 -22.656 -29.137
                         92
                                                   6.801
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1073
             05'
                  ADE
                         92
                                 -21.359 -29.205
                                                    4.658
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1074
             C5'
                 ADE
                         92
                                 -20.838 -28.668
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                                    3.456
ATOM
       1075
              C4'
                 ADE
                         92
                                 -19.759 -29.592
                                                    2.887
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1076
              04'
                  ADE
                         92
                                 -18.695 -29.739
                                                    3.815
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1077
              C1'
                  ADE
                         92
                                 -18.200 -31.055
                                                    3.721
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1078
              N9
                  ADE
                         92
                                 -17.427 -31.415
                                                    4.931
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1079
              68
                  ADE
                         92
                                 -17.829 -31.357
                                                    6.242
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                                           1.00
              N7
                  ADE
                                 -16.922 -31.730
                                                    7.102
                                                                 0.00
ATOM
        1080
                         92
ATOM
        1081
              C5
                  ADE
                          92
                                 -15.836 -32.058
                                                    6.301
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C6
                  ADE
                                 -14.544 -32.530
ATOM
        1082
                          92
                                                    6.594
                                                           1.00
                                                                 0.00
              N6
                  ADE
                          92
                                 -14.141 -32.753
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1083
                                                    7.847
                                 -13.687 -32.748
ATOM
        1084
              N1
                  ADE
                                                    5.579
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          92
ATOM
        1085
              C2
                  ADE
                                 -14.100 -32.518
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          92
                                                    4.334
ATOM
        1086
              N3 - ADE
                          92
                                 -15.293 -32.095
                                                    3.925
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  ADE
ATOM
        1087
              C4
                          92
                                 -16.130 -31.871
                                                    4.974
                                                           1.00 0.00
ATOM
        1088
              C3' ADE
                          92
                                 -20.278 -31.011
                                                    2.602
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1089
              C2'
                  ADE
                                 -19.506 -31.841
                                                    3.630
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          92
ATOM
        1090
              03'
                  ADE
                          92
                                 -19.965 -31.348
                                                    1.261
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1091
              P
                  CYT
                          93
                                 -20.484 -32.708
                                                    0.564
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1092
              OP1 CYT
                          93
                                 -21.423 -33.393
                                                    1.480
                                                           1.00
                                                                  0.00
              OP2 CYT
ATOM
        1093
                          93
                                 -20.897 -32.394
                                                   -0.821
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1094
              05' CYT
                          93
                                 -19.134 -33.577
                                                    0.501
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C5' CYT
 ATOM
        1095
                          93
                                 -18.101 -33.259
                                                   -0.414
                                                           1.00
                                                                  0.00
        1096
              C4' CYT
                          93
                                 -16.895 -34.160
                                                                  0.00
ATOM
                                                   -0.145
                                                           1.00
              04' CYT
ATOM
        1097
                          93
                                 -16.499 - 34.000
                                                    1.198
                                                           1.00
                                                                  0.00
        1098
              C1' CYT
                          93
                                 -15.884 -35.185
                                                    1.644 1.00 0.00
ATOM
```

					(149)					0 3 - 1	3 5 0 8 7
	295								296		
ATOM	1099	N1	CYT	93	-15.990 -3			1.00	0.00		
ATOM	1100	C6	CYT	93	-17.164 -3		3.743	1.00	0.00		
ATOM	1101	C5	CYT	93	-17.293 -3		5.088	1.00	0.00		
ATOM	1102	C4	CYT	93	-16.138 -3		5.838	1.00	0.00		
ATOM	1103	N4	CYT	93	-16.145 -3	5.321	7.171	1.00	0.00		
ATOM	1104	N3	CYT	93	-15.002 -3			1.00	0.00		
ATOM	1105	C2	CYT	93	-14.894 -3			1.00	0.00		
ATOM	1106	02	CYT	93	-13.845 -3			1.00	0.00		
ATOM	1107	C3'	CYT	93	-17.218 -3	5.653	-0.297	1.00	0.00		
ATOM	1108	C2'	CYT	93	-16.718 -3	6.291	0.997	1.00	0.00		
ATOM	1109	03'	CYT	93	-16.540 -3	6.200	-1.408	1.00	0.00		
END											
HEADER	0000	000			,						
REMARK 0.000		0.0	0527	1.65940	0.02522	0.01	767 2	.33456	1.5987	'6	
REMARK		2.3	2847	0.17908	0.41365	1.06	867 0	.66707			
REMARK		0.0	0879	0.00369	0.00421	0.01	643 0	.00778			
REMARK	0	٠	110	108	2		0	0		0	
REMARK			1378	305	460		273	340			
REMARK	(	0.0	3112	0.12157	0.02804	0.04	027 0	.10009	0.1215	57	
REMARK	ζ	4.7	6339	0.38764							
REMARK			1	0	0		1	0		0	
	0										
ATOM	1				12.394 -3						
ATOM	2		GLU		11.131 -3						
ATOM	3		GLU	1	9.933 -3						
ATOM	4	CG	GLU	1	8.584 -3		27.125				
ATOM	5 6		GLU GLU	1	7.995 -2 7.689 -2		27.053 25.924				
ATOM Atom	7		GLU GLU	1	7.896 -2		28.129				
ATOM	8		GLU	1	10.971 -2		26.524				
ATOM	9		GLU	1	11.026 -2		25.318				
ATOM	10	N	LYS	2	10.771 -2		27.454				1
ATOM	11	CA	LYS	2	10.561 -2		27.178				
ATOM	12		LYS	2	10.506 -2		28.491	1.00			
ATOM	13		LYS	2	9.310 -2		29.365				
ATOM	14		LYS	2	9.241 -2		30.680				
ATOM	15		LYS	2	8.952 -2		30.461	1.00			
ATOM	16		LYS	2	8.742 -2		31.739				
ATOM	17		LYS	2	11.631 -2		26.254				
ATOM	18	0	LYS	. 2	12.822 -2	26.057	26.519	1.00	0.00		
ATOM	19	N	HIS	3	11.176 -2	25.260	25.182	1.00	0.00		
ATOM	20	CA	HIS	3	11.985 -2	24.600	24.165	1.00	0.00		

					(130)			151H1 Z U 1
	297							298
ATOM	21	CB	HIS	3	12.507 -25.613	23.133	1.00	0.00
ATOM	22	CG	HIS	. 3	13.628 -26.496	23.619	1.00	0.00
ATOM	23	ND1	HIS	3	13.416 -27.776	24.109	1.00	0.00
ATOM	. 24	CE1	HIS	3	14.613 -28.280	24.450	1.00	0.00
ATOM	25	NE2	HIS	3	15.614 -27.428	24.222	1.00	0.00
ATOM	26	CD2	HIS	3	14.986 -26.303	23.697	1.00	0.00
ATOM	27	C	HIS	3	11.118 -23.549	23.465	1.00	0.00
ATOM	28	0	HIS	3	11.483 -22.380	23.385	1.00	0.00
ATOM	29	N	ARG	4	9.963 -23.992	22.955	1.00	0.00
ATOM	30	CA	ARG	4	8.986 -23.184	22.238	1.00	0.00
ATOM	31	CB	ARG	4	7.831 -24.099	21.802	1.00	0.00
ATOM	32	CG	ARG	4	8.280 -25.119	20.743	1.00	0.00
ATOM	33	CD	ARG	4	7.455 -26.413	20.814	1.00	0.00
ATOM	34	NE	ARG	4	7.673 -27.147	22.073	1.00	0.00
ATOM	35	CZ	ARG	4	8.799 -27.799	22.411	1.00	0.00
ATOM	36	NH1	ARG	4	9.812 -27.907	21.542	1.00	0.00
ATOM	37	NH2	ARG	4	8.922 -28.334	23.629	1.00	0.00
ATOM	38	C	ARG	4	8.458 -22.041	23.110	1.00	0.00
ATOM	39	0	ARG	4	7.688 -22.280	24.037	1.00	0.00
ATOM	40	N	ALA	5	8.861 -20.802	22.799	1.00	0.00
ATOM	41	CA	ALA	5	8.447 -19.592	23.502	1.00	0.00
ATOM	42	CB	ALA	5	9.535 -19.199	24.507	1.00	0.00
ATOM	43	C	ALA	5	8.166 -18.480	22.486	1.00	0.00
ATOM	44	0	ALA	5	8.525 -17.324	22.695	1.00	0.00
ATOM	45	N	ARG	6	7.523 -18.853	21.375	1.00	0.00
ATOM	46	CA	ARG	6	7.161 -17.996	20.253	1.00	0.00
ATOM	47	CB	ARG	6	8.445 -17.738	19.438	1.00	0.00
ATOM	48	CG	ARG	6	8.317 -16.826	18.210	1.00	0.00
ATOM	49	CD	ARG	6	8.060 -15.353	18.548	1.00	0.00
ATOM	50	NE	ARG	6	7.885 -14.592	17.303	1.00	0.00
ATOM	51	CZ	ARG	6	7.931 -13.258	17.164	1.00	0.00
ATOM	52		ARG	6	8.005 -12.734	15.936	1.00	0.00
ATOM	53	NH2	ARG	6	7.922 -12.447	18.230	1.00	0.00
ATOM	54	C	ARG	6	6.102 -18.761	19.449	1.00	0.00
ATOM	55	0	ARG	6	5.939 -19.966	19.667	1.00	0.00
ATOM	56	N	LYS	7	5.379 -18.094	18.543	1.00	
ATOM	57	CA	LYS	7	4.356 -18.702	17.699	1.00	
ATOM	58	CB	LYS	7	2.947 -18.380	18.229	1.00	0.00
ATOM	59	CG	LYS	. 7	2.703 -18.798	19.685	1.00	0.00
ATOM	60	CD	LYS	7	2.642 -20.326	19.841	1.00	0.00
ATOM	61	CE	LYS	7	2.822 -20.776	21.295	1.00	0.00
ATOM	62	NZ	LYS	7	4.163 -20.431	21.807	1.00	0.00
ATOM	63	С	LYS	7	4.538 -18.210	16.260	1.00	0.00
ATOM	64	0	LYS	7	5.426 -17.409	15.975	1.00	0.00
ATOM	65	N	ARG	8	3.692 -18.710	15.350	1.00	0.00
ATOM	66	CA	ARG	8	3.708 -18.382	13.931	1.00	0.00
ATOM	67	CB	ARG	8	3.288 -16.923	13.661	1.00	0.00
ATOM	68	CG	ARG	8	1.761 -16.752	13.548	1.00	0.00
ATOM	69	CD	ARG	8	1.021 -17.281	14.780	1.00	0.00
ATOM	70	NE	ARG	8	-0.433 -17.070	14.698	1.00	0.00

299 300 1.00 0.00 ATOM 71 CZ ARG 8 -1.317 -17.572 15.580 1.00 0.00 NH1 ARG 8 -2.621 -17.318 15.443 ATOM -0.899 -18.324 16.608 1.00 0.00 ATOM 73 NH2 ARG 8 5.066 -18.769 13.337 1.00 0.00 C ARG 8 ATOM 74 ATOM 75 0 ARG 8 5.909 -17.918 13.059 1.00 0.00 9 5.268 -20.078 13.154 1.00 0.00 N GLN ATOM 76 1.00 ATOM CA GLN 9 6.500 -20.643 12.631 0.00 77 GLN 9 12.964 0.00 CB 6.552 -22.139 1.00 ATOM 78 CG GLN 9 6.581 -22.385 14.479 1.00 0.00 ATOM 79 CDGLN 9 6.269 -23.842 14.790 1.00 0.00 ATOM 80 ATOM OE1 GLN 9 7.159 -24.613 15.138 1.00 0.00 NE2 GLN 9 5.001 -24.223 14.650 1.00 0.00 ATOM 82 ATOM C GLN 9 6.602 -20.417 11.123 1.00 0.00 83 0 9 10.334 GLN 6.199 -21.276 1.00 0.00 ATOM 84 0.00 ATOM 85 N ALA 10 7.161 -19.258 10.751 1.00 ATOM CA ALA 7.399 -18.830 9.378 1.00 0.00 86 10 ATOM 87 CBALA 10 8.300 -17.593 9.383 1.00 0.00 ATOM 88 C ALA 10 8.045 -19.965 8.587 1.00 0.00 9.052 -20.524 ATOM 89 0 ALA 10 9.022 1.00 0.00 N TRP ATOM 90 7.464 - 20.3167.438 1.00 0.0011 CA TRP 7.972 -21.395 6.611 1.00 ATOM 91 11 0.00 CB TRP 6.993 -21.691 5.475 1.00 0.00 ATOM 92 11 **ATOM** CG TRP 11 5.700 -22.375 5.817 1.00 0.00 ATOM CD1 TRP 4.820 -22.029 6.784 1.00 0.00 94 11 ATOM 95 NE1 TRP 11 3.742 -22.890 6.782 1.00 0.00 ATOM CE2 TRP 3.883 -23.853 5.805 1.00 0.00 96 11 **ATOM** CZ2 TRP 11 3.088 -24.935 5.405 1.00 0.00 CH2 TRP ATOM 98 11 3.534 - 25.7544.362 1.00 0.00 CZ3 TRP 4.753 -25.486 1.00 ATOM 99 11 3.722 0.00 CE3 TRP ATOM 5.534 -24.392 4.124 1.00 0.00 100 11 CD2 TRP 5.127 -23.550 0.00 ATOM 101 11 5.178 1.00 **ATOM** 102 C TRP 9.347 -21.042 6.038 1.00 0.00 11 1.00 ATOM 103 0 TRP 9.623 -19.886 0.00 11 5.722 ATOM 104 N LEU 12 10.199 -22.063 5.900 1.00 0.00 LEU ATOM 105 CA12 11.544 -21.960 5.350 1.00 0.00 ATOM 106 CBLEU 12 12.526 -22.799 6.182 1.00 0.00 **ATOM** CG LEU 12.631 -22.349 7.652 1.00 0.00 107 12 ATOM 108 CD1 LEU 12 11.607 -23.051 8.559 1.00 0.00 CD2 LEU ATOM 109 12 14.035 -22.666 8.180 1.00 0.00 C LEU 11.494 -22.474 0.00 ATOM 110 12 3.911 1.00 **ATOM** 0 LEU 10.517 -23.127 3.535 1.00 0.00 111 12 N TRP ATOM 112 13 12.526 -22.211 3.089 1.00 0.00 CATRP 12.464 -22.720 ATOM 113 13 1.725 1.00 0.00 13.510 -22.202 ATOM CBTRP 13 0.735 1.00 0.00 114 CG TRP 14.922 -22.678 0.881 1.00 0.00 ATOM 115 13 ATOM CD1 TRP 13 15.900 -21.868 1.298 1.00 0.00 116 ATOM 117 NE1 TRP 13 17.105 -22.532 1.354 1.00 0.00 ATOM 118 CE2 TRP 13 16.954 -23.844 0.9551.00 0.00 17.856 -24.912 0.00 ATOM 119 CZ2 TRP 13 0.836 1.00 CH2 TRP **ATOM** 120 13 17.389 -26.157 0.389 1.00 0.00

	004				(104)			ישוניו
	301							302
ATOM	121	CZ3		13	16.032 -26.315	0.063	1.00	0.00
ATOM	122	CE3		13	15.139 -25.237	0.185	1.00	0.00
ATOM	123	CD2		13	15.567 -23.970	0.638	1.00	0.00
ATOM	124	C	TRP	13	12.413 -24.231	1.706	1.00	0.00
ATOM	125	0	TRP	13	11.826 -24.755	0.782	1.00	0.00
ATOM	126	N	GLU	14	12.979 -24.971	2.665	1.00	0.00
ATOM	127	CA	GLU	14	12.839 -26.416	2.562	1.00	0.00
ATOM	128	CB	GLU	14	13.530 -27.163	3.703	1.00	0.00
ATOM	129	CG	GLU	14	15.055 -27.134	3.589	1.00	0.00
ATOM	130	CD	GLU	14	15.683 -28.133	4.555	1.00	0.00
ATOM	131	0E1	GLU	14	15.349 -29.333	4.419	1.00	0.00
ATOM	132	0E2	GLU	14	16.467 -27.685	5.415	1.00	0.00
ATOM	133	С	GLU	14	11.359 -26.777		1.00	0.00
ATOM	134	0	GLU	14	10.964 -27.549		1.00	0.00
ATOM	135	N	GLU	15	10.549 -26.188	3.372	1.00	0.00
ATOM	136		GLU	15	9.121 -26.416	3.383	1.00	0.00
ATOM	137	СВ	GLU	15	8.510 -25.778	4.634	1.00	0.00
ATOM	138	CG	GLU	15	9.201 -26.236	5.922	1.00	0.00
ATOM	139	CD	GLU	15	8.293 -25.996	7.120	1.00	0.00
ATOM	140		GLU	15	8.254 -24.848		1.00	0.00
ATOM	141		GLU	15	7.595 -26.961		1.00	0.00
ATOM	142	C	GLU	15	8.476 -25.905	2.087	1.00	0.00
ATOM	143	0	GLU	15	7.806 -26.669	1.398	1.00	0.00
ATOM	144	N	ASP	16	8.664 -24.624	1.742	1.00	0.00
ATOM	145	CA	ASP	16	8.067 -24.030	0.543	1.00	0.00
ATOM	146	CB	ASP	16	8.402 -22.535	0.448	1.00	0.00
ATOM	147	CG	ASP	16	7.816 -21.706	1.580	1.00	0.00
ATOM	148		ASP	16	6.768 -22.112	2.120	1.00	0.00
ATOM	149		ASP	16	8.390 -20.632	1.857	1.00	0.00
ATOM	150	C	ASP	16	8.511 -24.716	-0.749	1.00	0.00
ATOM	151	0	ASP	16	7.681 -25.165	-1.537	1.00	0.00
ATOM	152	N	LYS	17	9.827 -24.777		1.00	0.00
ATOM	153		LYS	17	10.474 -25.369	-2.126	1.00	0.00
			LYS		12.014 -25.295	-1.955	1.00	
ATOM ATOM	154 155	CB CG	LYS	17 17	12.783 -25.614	-3.244	1.00	0.00
			LYS		12.898 -24.425	-4.214		
ATOM	156	CD CE		17			1.00	0.00
ATOM	157	NZ	LYS LYS	17	13.568 -23.174	-3.622	1.00	0.00
ATOM	158	NZ C		17	14.829 -23.482	-2.917	1.00	0.00
ATOM	159		LYS	17	9.942 -26.799	-2.291	1.00	0.00
ATOM	160	0 N	LYS	17	9.502 -27.176	-3.377	1.00	0.00
ATOM	161	N	ASN	18	9.957 -27.586	-1.205	1.00	0.00
ATOM	162	CA	ASN	18	9.459 -28.954	-1.214	1.00	0.00
ATOM	163	CB	ASN	18	9.715 -29.611	0.141	1.00	0.00
ATOM	164	CG	ASN	18	9.151 -31.018	0.180	1.00	0.00
ATOM	165		ASN	18	9.596 -31.880	-0.568	1.00	0.00
ATOM	166		ASN	18	8.161 -31.239	1.044	1.00	0.00
ATOM	167	C	ASN	18	7.967 -29.022	-1.547	1.00	0.00
ATOM	168	0	ASN	18	7.567 -29.851	-2.358	1.00	0.00
ATOM	169	N	LEU	19	7.143 -28.171	-0.926	1.00	0.00
ATOM	170	CA	LEU	19	5.703 -28.143	-1.147	1.00	0.00

```
303
                                                                   304
                                  5.063 -27.050 -0.277 1.00 0.00
ATOM
        171 CB LEU
                         19
                                  3.540 -26.958
                                                 -0.455
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        172
            CG
                 LEU
                         19
        173 CD1 LEU
                                  2.874 -28.285
                                                 -0.078
                                                         1.00
                                                                0.00
                         19
ATOM
ATOM
        174
             CD2 LEU
                         19
                                  2.987 -25.819
                                                  0.407
                                                          1.00
                                                                0.00
             C
                         19
                                  5.394 -27.915 -2.624
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        175
                 LEU
ATOM
        176
             0
                 LEU
                         19
                                  4.679 -28.703 -3.238
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        177 N
                 ARG
                         20
                                  5.944 -26.835
                                                 -3.184
                                                          1.00
                                                                0.00
                                  5.780 -26.448 -4.578
ATOM
        178 CA
                 ARG
                         20
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                  6.627 -25.191 -4.833
ATOM
        179 CB
                 ARG
                         20
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 ARG
                                  6.058 -24.000
                                                 -4.041
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        180
             CG
                         20
                                                          1.00
                 ARG
                                  7.078 -22.883
                                                 -3.808
                                                                 0.00
ATOM
        181
             CD
                         20
                                                          1.00
ATOM
        182
             NE
                 ARG
                         20
                                  7.462 -22.210 -5.055
                                                                 0.00
        183
             CZ
                 ARG
                         20
                                  8.119 -21.039 -5.110
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
        184
             NH1 ARG
                         20
                                  8.488 -20.412 -3.984
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             NH2 ARG
                                  8.411 -20.498
                                                  -6.299
                                                           1.00
                                                                 0.00
        185
                         20
ATOM
        186
             C
                  ARG
                         20
                                   6.178 - 27.629
                                                  -5.470
                                                          1.00
                                                                 0.00
             0
ATOM
        187
                  ARG
                         20
                                  5.421 -28.019
                                                  -6.361
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        188
             N
                  SER
                         21
                                  7.351 -28.222
                                                  -5.210
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                  7.828 -29.383
ATOM
        189
             CA
                 SER
                         21
                                                  -5.947
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  SER
                                   9.195 -29.821
ATOM
        190
             CB
                         21
                                                  -5.413
                                                           1.00
                                                                 0.00
             0G
                  SER
                                  10.158 -28.841
                                                  -5.742
ATOM
        191
                         21
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        192
             C
                  SER
                         21
                                   6.810 - 30.524
                                                  -5.877
                                                           1.00
                                                                 0.00
        193
             0
                  SER
                                   6.505 - 31.125
                                                  -6.906
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         21
             N
                  GLY
                         22
                                                                 0.00
ATOM
        194
                                   6.294 - 30.808
                                                  -4.678
                                                           1.00
ATOM
        195
             CA
                 GLY
                         22
                                   5.313 -31.845
                                                  -4.408
                                                           1.00
                                                                 0.00
             С
                  GLY
        196
                         22
                                   4.048 -31.645
                                                  -5.231
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
                  GLY
                                   3.593 -32.576
                                                  -5.894
                                                                 0.00
ATOM
        197
             0
                         22
                                                           1.00
ATOM
        198
             N
                  VAL
                         23
                                   3.496 -30.426
                                                  -5.206
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        199
              CA
                 VAL
                         23
                                   2.312 -30.084
                                                  -5.981
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CB
                 VAL
                         23
                                   1.883 -28.630
                                                  -5.717
ATOM
        200
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        201
              CG1 VAL
                         23
                                   0.755 - 28.199
                                                  -6.666
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        202
              CG2 VAL
                         23
                                   1.369 -28.483
                                                  -4.279
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        203
              C
                  VAL
                         23
                                   2.615 -30.357
                                                  -7.455
                                                           1.00
                                                                 0.00
              0
                  VAL
                                                  -8.163
ATOM
         204
                         23
                                   1.768 -30.887
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         205
             N
                  ARG
                         24
                                   3.825 -30.027
                                                  -7.923
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         206
              CA
                  ARG
                         24
                                   4.196 -30.296
                                                  -9.306
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CB
                  ARG
                                   5.448 -29.492
                                                 -9.709
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         207
                         24
              CG
                  ARG
                                   5.140 -28.402 -10.752
ATOM
         208
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         24
ATOM
         209
              CD
                  ARG
                         24
                                   5.094 -28.940 -12.191
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              NE
                  ARG
                                   4.145 -30.050 -12.349
                                                           1.00
                                                                 0.00
         210
                         24
ATOM
         211
              cz
                  ARG
                         24
                                   2.809 -29.959 -12.428
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         212
              NH1 ARG
                                   2.184 -28.798 -12.645
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          24
              NH2 ARG
                                   2.077 -31.054 -12.232
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         213
                         24
ATOM
         214
              C
                  ARG
                                   4.352 -31.803
                                                 -9.583
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          24
                  ARG
ATOM
         215
              0
                          24
                                   4.118 -32.248 -10.705
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         216
              N
                  LYS
                          25
                                   4.753 - 32.596
                                                  -8.583
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CA
                                   4.942 -34.038
                                                  -8.731
ATOM
         217
                  LYS
                          25
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CB
                  LYS
                          25
                                                  -7.600
         218
                                   5.828 -34.601
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
         219
              CG
                 LYS
                                   7.288 - 34.905
                                                  -7.982
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          25
ATOM
         220
             CD LYS
                                   8.224 -33.693 -7.902 1.00 0.00
                          25
```

```
305
                                                                   306
ATOM
        221 CE
                LYS
                         25
                                  8.164 -32.806
                                                -9.152 1.00 0.00
             NZ
                 LYS
                         25
ATOM
        222
                                  8.553 -31.420
                                                 -8.845
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        223
             C
                 LYS
                         25
                                  3.621 -34.817
                                                 -8.771
                                                          1.00
                                                                0.00
        224 0
                 LYS
                         25
ATOM
                                  3.509 -35.750
                                                 -9.564
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        225
             N
                 TYR
                         26
                                  2.659 -34.486
                                                 -7.899
                                                          1.00
                                                                0.00
            CA
                 TYR
                         26
ATOM
        226
                                  1.405 -35.235
                                                 -7.777
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        227
             CB
                 TYR
                         26
                                  1.327 -35.802
                                                 -6.351
                                                          1.00
                                                                0.00
            CG TYR
ATOM
        228
                         26
                                  2.643 -36.366
                                                 -5.841
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        229
             CD1 TYR
                         26
                                  3.175 -37.544
                                                 -6.396
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        230
             CE1 TYR
                         26
                                  4.400 -38.052 -5.928
                                                          1.00
                                                                0.00
             CZ TYR
ATOM
        231
                         26
                                  5.096 -37.384
                                                  -4.904
                                                          1.00
                                                                0.00
        232 OH TYR
ATOM
                         26
                                  6.287 -37.872 -4.449
                                                          1.00
                                                                0.00
        233 CE2 TYR
ATOM
                         26
                                  4.566 -36.209
                                                 -4.349
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        234 CD2 TYR
                         26
                                  3.342 -35.701
                                                 -4.817
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        235
            C
                 TYR
                         26
                                  0.127 - 34.456
                                                  -8.099
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        236
             0
                 TYR
                         26
                                 -0.937 -35.068
                                                 -8.178
                                                          1.00
                                                                0.00
        237 N
                                                          1.00
ATOM
                 GLY
                         27
                                  0.204 -33.134 -8.263
                                                                0.00
ATOM
        238 CA
                 GLY
                         27
                                 -0.953 -32.288
                                                 -8.532
                                                          1.00
                                                                0.00
                 GLY
ATOM
        239
            C
                         27
                                 -1.547 -31.801 -7.209
                                                          1.00
                                                                0.00
             0
                 GLY
ATOM
        240
                         27
                                 -1.244 - 32.351 - 6.147
                                                          1.00
                                                                0.00
             N
                  GLU
                                 -2.398 -30.767 -7.252
ATOM
        241
                         28
                                                          1.00
                                                                0.00
             CA
                 GLU
                                                 -6.043
ATOM
        242
                         28
                                 -3.018 -30.237
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        243
             CB
                 GLU
                         28
                                 -3.685 -28.876 -6.324
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             CG
                 GLU
                         28
                                 -3.920 -28.131
                                                  -5.003
        244
                                                          1.00
                                                                 0.00
        245
ATOM
             CD
                 GLU
                         28
                                 -4.456 -26.709
                                                 -5.140
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        246
             OE1 GLU
                         28
                                 -4.024 -26.002 -6.078
                                                          1.00
                                                                 0.00^{\circ}
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        247
             OE2 GLU
                         28
                                 -5.237 -26.316
                                                  -4.243
ATOM
        248
             C
                  CLU
                         28
                                 -3.991 -31.276
                                                  -5.465
                                                          1.00
                                                                 0.00
             0
ATOM
        249
                  GLU
                         28
                                 -4.595 -32.044
                                                  -6.212
                                                          1.00
                                                                 0.00
        250
             N
                  GLY
ATOM
                         29
                                  -4.134 -31.308
                                                  -4.136
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        251
             CA
                 GLY
                         29
                                 -5.016 -32.241
                                                  -3.446
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C
                  GLY
                                                  -3.239
ATOM
        252
                         29
                                  -4.371 -33.606
                                                          1.00
                                                                 0.00
             0
                  GLY
ATOM
        253
                         29
                                  -5.025 -34.636
                                                  -3.387
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        254
             N
                  ASN
                         30
                                  -3.083 -33.604
                                                  -2.876
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CA
                 ASN
                         30
                                                  -2.594
ATOM
        255
                                  -2.292 -34.798
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CB
                 ASN
                                  -1.512 -35.230
                                                  -3.846
                                                                 0.00
ATOM
        256
                         30
                                                          1.00
ATOM
        257
              CG
                  ASN
                         30
                                  -2.422 -35.693
                                                  -4.980
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        258
              OD1 ASN
                         30
                                  -2.775 -36.867
                                                  -5.051
                                                          1.00
                                                                 0.00
              ND2 ASN
                                  -2.781 -34.781
                                                  -5.880
ATOM
        259
                         30
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         260
              С
                  ASN
                         30
                                  -1.341 -34.470
                                                  -1.442
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         261
              0
                  ASN
                         30
                                  -0.199 -34.925
                                                  -1.419
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         262
              N
                  TRP
                         31
                                  -1.808 -33.664
                                                  -0.484
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CA
                  TRP
ATOM
         263
                         31
                                  -1.021 -33.228
                                                   0.662
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         264
              CB
                  TRP
                         31
                                  -1.788 -32.182
                                                   1.477
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         265
              CG
                  TRP
                                  -2.558 -31.239
                                                   0.611
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         31
              CD1 TRP
ATOM
         266
                         31
                                  -3.899 -31.225
                                                   0.431
                                                          1.00
                                                                 0.00
              NE1 TRP
ATOM
                                  -4.241 -30.232
                                                  -0.462
         267
                         31
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CE2 TRP
ATOM
         268
                         31
                                  -3.119 -29.552
                                                  -0.897
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CZ2 TRP
                                  -2.926 -28.485
         269
                         31
                                                  -1.785
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         270
             CH2 TRP
                         31
                                  -1.623 -28.025
                                                 -2.026
                                                         1.00 0.00
```

(155)307 271 CZ3 TRP -1.382 1.00 0.00 ATOM 31 -0.533 - 28.624CE3 TRP -0.734 -29.691 -0.4921.00 0.00 ATOM 272 31 CD2 TRP -2.030 -30.179-0.2271.00 ATOM 273 31 0.00 ATOM 274 C TRP 31 -0.554 - 34.4271.477 1.00 0.00 275 0 TRP 0.575 -34.429 1.962 1.00 0.00 ATOM 31 0.00 ATOM 276 N SER 32 -1.405 -35.452 1.587 1.00 CA SER 32 -1.090 -36.694 2.275 1.00 0.00 ATOM 277 ATOM 278 CB SER 32 -2.276 -37.657 2.156 1.00 0.00 1.00 **ATOM** 279 0GSER 32 -2.687 -37.787 0.805 0.00 ATOM 280 C SER 32 0.173 -37.299 1.655 1.00 0.00 ATOM 281 0 SER 32 1.116 -37.647 2.361 1.00 0.00 ATOM 282 N LYS 33 -0.194 - 37.4100.323 1.00 0.00 1.329 -37.952 **ATOM** 283 CA LYS 33. -0.4021.00 0.00 ATOM 284 CBLYS -33 -1.018 -38.076 -1.9011.00 0.00 LYS ATOM 285 CG 33 -0.219 -38.924-2.2291.00 0.00 ATOM 286 CD LYS 33 -0.187 -40.355 -1.664 1.00 0.00 ATOM 287 CE LYS 33 1.118 -41.121 -1.9281.00 0.00 ATOM 288 NZ LYS 33 1.525 -41.088 -3.3451.00 0.00 ATOM 289 С LYS 33 2.566 - 37.082-0.1871.00 0.00 **ATOM** 290 0 LYS 33 3.617 -37.599 0.178 1.00 0.00 N ATOM 291 ILE 34 2.442 - 35.771-0.4151.00 0.00 ATOM 292 CA ILE 34 3.535 -34.817 -0.2671.00 0.00 CBILE 3.024 -33.389 ATOM 293 34 -0.5661.00 0.00 ATOM 294 CG2 ILE 34 4.092 -32.316 -0.3131.00 0.00 295 CG1 ILE 2.589 -33.286 -2.0411.00 0.00 ATOM 34 CD1 ILE ATOM 296 34 1.853 -31.986 -2.3731.00 0.00 С 4.193 -34.972 1.00 ATOM 297 ILE 1.113 0.00 34 0 ILE 5.401 -35.193 1.00 0.00 ATOM 298 34 1.192 N 3.419 -34.872 ATOM 299 LEU 2.200 1.00 0.00 35  $\mathsf{CA}$ LEU 35 3.955 -35.004 ATOM 300 3.551 1.00 0.00 ATOM 301 CBLEU 2.980 -34.443 4.603 1.00 0.00 35 LEU ATOM 302 CG 35 1.726 - 35.2904.889 1.00 0.00 ATOM 303 CD1 LEU 35 1.960 -36.325 6.000 1.00 0.00 ATOM 304 CD2 LEU 35 0.571 - 34.3805.325 1.00 0.00 ATOM 305 C LEU 35 4.459 - 36.4163.855 1.00 0.00 ATOM 306 0 LEU 35 5.382 -36.561 4.650 1.00 0.00 ATOM 307 N LEU 36 3.880 -37.456 3.237 1.00 0.00 CALEU ATOM 308 36 4.308 -38.832 3.464 1.00 0.00 CBLEU 3.266 -39.800 0.00 ATOM 309 36 2.882 1.00 CG ATOM 310 LEU 3.652 -41.286 2.967 1.00 0.00 36 CD1 LEU 1.00 0.00 ATOM 311 36 3.810 -41.754 4.418 ATOM CD2 LEU 2.567 -42.120 2.277 1.00 312 36 0.00 ATOM 313 C LEU 36 5.693 -39.061 2.854 1.00 0.00 ATOM 314 0 LEU 36 6.580 - 39.6053.507 1.00 0.00 ATOM HIS 5.871 -38.651 1.594 1.00 0.00 315 N 37 ATOM 316 CA HIS 37 7.119 -38.805 0.863 1.00 0.00 ATOM 317 CBHIS 37 6.888 -38.487 -0.6221.00 0.00 ATOM 318 CG HIS 37 5.978 -39.459 -1.3301.00 0.00

6.236 -40.820

-1.383

5.242 -41.390 -2.086 1.00 0.00

1.00

0.00

ND1 HIS

CE1 HIS

37

37

319

320

ATOM

ATOM

	309				,,				310
ATOM	321	NE2	HIS	37	4.332	-40.507	-2.509	1.00	0.00
ATOM	322	CD2		37		-39.289	-2.025	1.00	0.00
ATOM	323	C	HIS	37		-37.904	1.417	1.00	0.00
ATOM	324	0	HIS	37		-38.331	1.510	1.00	0.00
ATOM	325	N	TYR	38		-36.655	1.752	1.00	0.00
ATOM	326	CA	TYR	38		-35.655	2.238	1.00	0.00
ATOM	327	CB	TYR	38		-34.391	1.398	1.00	0.00
ATOM	328	CG	TYR	38		-34.614	-0.103	1.00	0.00
ATOM	329		TYR	38		-33.993	-0.819	1.00	0.00
ATOM	330		TYR	38		-34.184	-2.203	1.00	0.00
ATOM	331	CZ	TYR	38		-35.002	-2.884	1.00	0.00
ATOM	332	OH	TYR	38		-35.183	-4.230	1.00	0.00
ATOM	333		TYR	38		-35.627	-2.178	1.00	0.00
ATOM	334		TYR	38		-35.433	-0.791	1.00	0.00
ATOM	335	CDZ	TYR	38		-35.433	3.744	1.00	0.00
ATOM	336	0	TYR	38		-36.352	4.484	1.00	0.00
ATOM	337	N	LYS	39		-34.173	4.207	1.00	0.00
ATOM	338	CA	LYS	39		-33.796	5.610	1.00	0.00
ATOM	339	CB	LYS	39		-34.195	6.398	1.00	0.00
ATOM	340	CG	LYS	39		-33.151	6.467	1.00	0.00
ATOM	341	CD	LYS	39		-32.796	5.115	1.00	0.00
ATOM	342	CE	LYS	39		-31.736	5.333	1.00	0.00
ATOM	343	NZ	LYS	39		-31.315	4.075	1.00	0.00
ATOM	344	C	LYS	39		-32.305	5.743	1.00	0.00
ATOM	345	0	LYS	39		-31.540	4.804	1.00	0.00
ATOM	346	N	PHE	40		-31.906	6.915	1.00	0.00
ATOM	347	CA	PHE	40		-30.536	7.263	1.00	0.00
ATOM	348	CB	PHE	40		-30.219	6.814	1.00	0.00
ATOM	349	CG	PHE	40		-30.228	5.316	1.00	0.00
ATOM	350		PHE	40		-31.351	4.680	1.00	0.00
ATOM	351		PHE	40		-31.346	3.290	1.00	0.00
ATOM	352	CZ	PHE	40		-30.220	2.529	1.00	0.00
ATOM	353		PHE	40		-29.101	3.167	1.00	0.00
ATOM	354		PHE	40		-29.104	4.558	1.00	0.00
ATOM	355	C	PHE	40		-30.368	8.779	1.00	0.00
ATOM	356	0	PHE	40		-31.357	9.508	1.00	0.00
ATOM	357	N	ASN	41		-29.118	9.253	1.00	0.00
ATOM	358	CA	ASN	41		-28.775	10.669	1.00	0.00
ATOM	359	CB	ASN			-27.304	10.807	1.00	0.00
ATOM	360	CG	ASN	41		-26.859	12.266	1.00	0.00
ATOM	361		ASN	41		-27.665	13.153	1.00	0.00
ATOM	362		ASN	41		-25.573	12.527	1.00	0.00
ATOM	363	С	ASN	41		-29.049	11.337	1.00	0.00
ATOM	364	0	ASN	41		-28.117	11.729	1.00	0.00
ATOM	365	N	ASN	42		-30.334	11.455	1.00	0.00
ATOM	366	CA	ASN	42		-30.816	12.053	1.00	0.00
ATOM	367	CB	ASN	42		-30.754	13.585	1.00	0.00
ATOM	368	CG	ASN	42		-31.351	14.267	1.00	0.00
ATOM	369	0D1	ASN	42		-32.240	13.724	1.00	0.00
ATOM	370	ND2	ASN	42	3.269	-30.871	15.467	1.00	0.00

```
311
                                                                    312
ATOM
        371 C
                  ASN
                         42
                                   3.527 -30.040 11.509 1.00 0.00
                                                  12.246
ATOM
        372
             0
                  ASN
                         42
                                   2.859 -29.316
                                                           1.00
                                                                0.00
ATOM
        373
            N
                  ARG
                                   3.271 -30.186
                                                   10.204
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         43
                  ARG
                                   2.194 -29.500
                                                   9.506
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        374 CA
                         43
             CB
                  ARG
                                   2.786 -28.687
                                                    8.355
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        375
                         43
             CG
                  ARG
                                   3.862 -27.732
                                                    8.885
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        376
                         43
ATOM
        377
              CD
                  ARG
                         43
                                   4.122 -26.650
                                                    7.844
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        378
             NE
                  ARG
                         43
                                   5.230 -25.766
                                                    8.226
                                                           1.00
                                                                 0.00
             CZ
                  ARG
ATOM
        379
                         43
                                   5.135 -24.688
                                                    9.022
                                                          1.00
                                                                 0.00
              NH1 ARG
ATOM
        380
                         43
                                   6.189 -23.876
                                                    9.173 1.00
                                                                 0.00
              NH2 ARG
                                                           1.00
ATOM
        381
                         43
                                   3.977 - 24.437
                                                    9.645
                                                                  0.00
ATOM
        382
              С
                  ARG
                         43
                                   1.135 - 30.481
                                                    9.009
                                                           1.00
                                                                  0.00
              0
                  ARG
ATOM
        383
                         43
                                   1.423 -31.653
                                                    8.773
                                                           1.00
                                                                  0.00
              N
                  THR
ATOM
        384
                         44
                                  -0.094 -29.978
                                                    8.864
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  THR
                                                                 0.00
ATOM
         385
              CA
                         44
                                  -1.262 -30.724
                                                    8.429
                                                           1.00
              CB
                  THR
                                  -2.459 -30.296
                                                                 0.00
ATOM
        386
                          44
                                                    9.294
                                                           1.00
              CG2 THR
                                  -2.179 -30.483
                                                   10.790
                                                                 0.00
ATOM
        387
                          44
                                                           1.00
              OG1 THR
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         388
                          44
                                  -2.771 - 28.937
                                                    9.034
              C
                  THR
                                  -1.591 -30.431
ATOM
         389
                          44
                                                    6.966
                                                           1.00
                                                                  0.00
              0
                  THR
                                  -1.038 - 29.515
                                                                  0.00
ATOM
         390
                          44
                                                    6.359
                                                           1.00
              N
                  SER
                                  -2.540 -31.195
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         391
                          45
                                                    6.419
ATOM
         392
              CA
                  SER
                          45
                                  -3.045 -31.016
                                                    5.066
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         393
              CB
                  SER
                                  -4.087 -32.107
                                                    4.801
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          45
ATOM
              0G
                  SER
                                  -4.750 -31.899
                                                           1.00
                                                                  0.00
         394
                          45
                                                    3.576
ATOM:
         395
              C
                  SER
                          45
                                  -3.609 - 29.594
                                                    4.930
                                                           1.00
                                                                  0.00
              0
                  SER
ATOM
         396
                          45
                                  -3.426 -28.945
                                                    3.899
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  VAL
                                  -4.271 -29.101
ATOM
         397
              N
                          46
                                                    5.988
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         398
              CA
                  VAL
                                  -4.824 -27.754
                                                    6.028
                                                          1.00
                                                                  0.00
                          46
ATOM
         399
              CB
                  VAL
                                  -5.643 - 27.514
                                                    7.310
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          46
              CG1 VAL
                                  -6.356 -26.159
ATOM
         400
                          46 ·
                                                    7.222
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         401
              CG2 VAL
                          46
                                  -6.702 -28.599
                                                    7.534
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         402
              C
                  VAL
                          46
                                  -3.681 - 26.744
                                                    5.899
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         403
              0
                  VAL
                          46
                                  -3.739 - 25.882
                                                    5.028
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         404
              N
                  MET
                          47
                                  -2.646 -26.855
                                                    6.748 1.00
                                                                  0.00
ATOM
         405
              CA
                  MET
                          47
                                  -1.483 - 25.967
                                                    6.709
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         406
              CB
                  MET
                          47
                                  -0.409 - 26.449
                                                    7.697
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                                    9.173 1.00
ATOM
         407
              CG
                  MET
                          47
                                  -0.744 - 26.240
                                                                  0.00
                                                    9.750
 ATOM
                  MET
                                  -0.580 -24.533
                                                           1.00
         408
              SD
                          47
                                                                  0.00
ATOM
              CE
                  MET
                          47
                                  -0.732 -24.829
                                                   11.527
                                                           1.00
                                                                  0.00
         409
              C
                  MET
                                   -0.872 -25.943
ATOM
         410
                          47
                                                    5.306
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
              0
                  MET
                          47
                                   -0.587 -24.878
                                                           1.00
                                                                  0.00
         411
                                                    4.760
 ATOM
         412
              N
                  LEU
                          48
                                   -0.664 -27.133
                                                    4.731
                                                           1.00
                                                                  0.00
              CA LEU
                                   -0.085 -27.314
 ATOM
         413
                          48
                                                    3.410 1.00
                                                                  0.00
              CB LEU
                                   0.043 - 28.817
                                                    3.109
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         414
                          48
 ATOM
         415
              CG
                  LEU
                          48
                                   1.157 -29.442
                                                    3.968
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         416
              CD1 LEU
                          48
                                   0.959 - 30.942
                                                    4.200
                                                           1.00
                                                                  0.00
              CD2 LEU
 ATOM
         417
                          48
                                   2.515 -29.268
                                                    3.291
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C
                  LEU
                                   -0.884 -26.552
                                                    2.355
                                                                  0.00
 ATOM
         418
                          48
                                                           1.00
                                   -0.318 -25.745
 ATOM
         419
              0
                  LEU
                          48
                                                    1.616
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         420
              N
                  LYS
                          49
                                   -2.199 -26.785
                                                    2.289 1.00 0.00
```

	313								314
ATOM	421	CA	LYS	49	-3 023	-26.076	1.326	1.00	0.00
ATOM	422	CB	LYS	49		-26.557	1.353	1.00	0.00
ATOM	423	CG	LYS	49		-25.730	0.316	1.00	0.00
ATOM	424	CD	LYS	49		-26.336	0.020		0.00
ATOM	425	CE	LYS	49		-27.600		1.00	
							-0.821	1.00	0.00
ATOM	426	NZ	LYS	49		-27.410	-2.254	1.00	0.00
ATOM	427	C	LYS	49		-24.575	1.577	1.00	0.00
ATOM	428	0	LYS	49		-23.814	0.634	1.00	0.00
ATOM	429	N	ASP	50		-24.150	2.829	1.00	0.00
ATOM	430	CA	ASP	50		-22.743	3.209	1.00	0.00
ATOM	431	CB	ASP	50		-22.609	4.730	1.00	0.00
ATOM	432	CG	ASP	50		-21.159	5.174	1.00	0.00
ATOM	433		ASP	50		-20.864	6.297	1.00	0.00
ATOM	434		ASP	50		-20.377	4.410	1.00	0.00
ATOM	435	C	ASP	50	· ·	-22.040	2.670	1.00	0.00
ATOM	436	0	ASP	50		-21.007	2.010	1.00	0.00
ATOM	437	N	ARG	51		-22.618	2.916	1.00	0.00
ATOM	438	CA	ARG	51		-22.059	2.410	1.00	0.00
ATOM	439	CB	ARG	51		-22.892	2.878	1.00	0.00
ATOM	440	CG	ARG	51		-22.285	2.443	1.00	0.00
ATOM	441	CD	ARG	51		-20.981	3.189	1.00	0.00
ATOM	442	NE	ARG	51	4.721	-20.500	2.912	1.00	0.00
ATOM	443	CZ	ARG	51	5.126	-19.218	2.927	1.00	0.00
ATOM	444		ARG	51		-18.905	2.592	1.00	0.00
ATOM	445		ARG	51		-18.239	3.273	1.00	0.00
ATOM	446	C	ARG	51	0.449	-21.975	0.884	1.00	0.00
ATOM	447	0	ARG	51		-20.946	0.313	1.00	0.00
ATOM	448	N	TRP	52		-23.046	0.216	1.00	0.00
ATOM	449	CA	TRP	52		-23.055	-1.235	1.00	0.00
ATOM	450	CB	TRP	52		-24.446	-1.738	1.00	0.00
ATOM	451	CG	TRP	52		-24.558	-3.220	1.00	0.00
ATOM	452	CD1		52		-24.969	-3.824	1.00	0.00
ATOM	453		TRP	52		-24.966	-5.190	1.00	0.00
ATOM	454		TRP	, 52		-24.536	-5.541	1.00	0.00
ATOM	455		TRP	52		-24.359	-6.776	1.00	0.00
ATOM	456		TRP	52		-23.891	-6.805	1.00	0.00
ATOM	457		TRP	52		-23.616	-5.601	1.00	0.00
ATOM	458		TRP	52		-23.802		1.00	0.00
ATOM	459		TRP	52		-24.267	-4.299	1.00	0.00
ATOM	460	C	TRP	52		-21.981	-1.741	1.00	0.00
ATOM	461	0	TRP	52		-21.386	-2.785	1.00	0.00
ATOM	462	N	ARG	53		-21.715	-1.019	1.00	0.00
ATOM	463	CA	ARG	53		-20.693	-1.375	1.00	0.00
ATOM	464	CB	ARG	53		-20.735	-0.443	1.00	0.00
ATOM	465	CG	ARG	53		-21.902	-0.797	1.00	0.00
ATOM	466	CD	ARG	53		-22.130	0.272	1.00	0.00
ATOM	467	NE	ARG	53		-20.920	0.542	1.00	0.00
ATOM	468	CZ	ARG	53		-20.694	0.208	1.00	0.00
ATOM	469		ARG	53		-19.556	0.619	1.00	0.00
ATOM	470	NH2	ARG	53	-9.179	-21.574	-0.513	1.00	0.00

315 316 ATOM 471 C ARG -2.447 -19.340 -1.336 1.00 0.00 53 ATOM 472 0 ARG 53 -2.550 -18.558 -2.2801.00 0.00 **ATOM** 473 N THR -1.706 -19.077 -0.2551.00 0.00 54 ATOM 474 CA THR -0.944 - 17.849-0.1021.00 0.00 54 ATOM 475 CB THR 54 -0.281 -17.833 1.284 1.00 0.00 ATOM 476 CG2 THR 0.463 - 16.5231.552 1.00 0.00 54 ATOM 477 OG1 THR 54 -1.288 -17.993 2.262 1.00 0.00 ATOM 478 C THR 0.074 -17.716 -1.2411.00 0.00 54 ATOM 479 0 THR 0.200 - 16.643-1.8221.00 54 0.00 ATOM N MET 0.798 -18.795 -1.571 1.00 0.00 480 55 **ATOM** CA MET 1.805 -18.792 -2.6271.00 0.00 481 55 1.00 ATOM 482 CBMET 55 2.588 -20.117 -2.613 0.00 ATOM CG MET 4.013 -20.013 -3.188 1.00 0.00 483 55 ATOM 484 SD MET 55 4.356 -20.614 -4.872 1.00 0.00 **ATOM** CE MET 3.643 -19.324 -5.9191.00 0.00 485 55 ATOM 486 C MET 55 1.181 -18.496 -3.9911.00 0.00 ATOM 487 0 MET 55 1.549 -17.507 -4.6271.00 0.00 LYS ATOM 488 N 56 0.248 - 19.346-4.4461.00 0.00 CA LYS -5.734ATOM 489 56 -0.420 -19.1931.00 0.00 ATOM 490 CBLYS -1.386 -20.360 -6.023 1.00 0.00 56 CG LYS -5.228ATOM 491 -2.693 -20.309 1.00 0.00 56 LYS ATOM 492 CD 56 -3.407 -21.669 -5.1371.00 0.00 ATOM CE LYS -3.853 -22.220 493 -6.4981.00 0.00 56 ATOM NZ LYS -6.358494 56 -4.722 -23.408 1.00 0.00 ATOM 495 C LYS 56 -1.022 -17.793 -5.8771.00 0.00 LYS 496 0 56 -0.967 -17.234 -6.9680.00 ATOM 1.00 LYS -1.551 -17.219 ATOM 497 N 57 -4.7861.00 0.00 ATOM CALYS -4.757498 57 -2.099 -15.866 1.00 0.00 ATOM 499 CBLYS 57 -2.836 -15.637 -3.4221.00 0.00 ATOM 500 CG LYS 57 -3.098 -14.157 -3.0831.00 0.00 ATOM 501 CD LYS 57 -3.901 -14.035 -1.7801.00 0.00 **ATOM** CE LYS -3.618 -12.730 -1.018502 57 1.00 0.00 ATOM 503 NZ LYS 57 -3.912 -11.516 -1.804 1.00 0.00 ATOM 504 C LYS 57 -0.972 -14.843 -4.937 1.00 0.00 ATOM 505 0 LYS 57 -1.056 -13.986-5.8131.00 0.00 LEU ATOM 506 N 58 0.059 - 14.923-4.0861.00 0.00 ATOM CA LEU 507 58 1.199 -14.016 -4.064 1.00 0.00 ATOM CB LEU 2.192 -14.464 -2.980 508 58 1.00 0.00 ATOM 509 CG LEU 58 3.436 -13.570 -2.848 1.00 0.00 ATOM CD1 LEU 3.073 -12.138 -2.437 510 58 1.00 0.00 ATOM CD2 LEU 4.372 -14.174 -1.7950.00 511 58 1.00 ATOM 512 C LEU 58 1.857 -13.897 -5.438 1.00 0.00 LEU 1.948 -12.797 -5.979 ATOM 513 0 58 1.00 0.00 N LYS 2.311 -15.019 -6.010 ATOM 514 59 1.00 0.00 ATOM CA LYS 59 2.930 -14.999 -7.331 0.00 515 1.00 **ATOM** CB LYS 59 3.618 -16.339 -7.6301.00 0.00 516 **ATOM** 517 CG LYS 59 4.248 -16.333 -9.032 1.00 0.00 ATOM 518 CD LYS 59 4.993 -17.634 -9.347 1.00 0.00 CE LYS ATOM 519 59 5.548 -17.558 -10.778 0.00 1.00 ATOM 520 NZ LYS 59 6.229 -18.801 -11.181 1.00 0.00

```
317
                                                                   318
ATOM
        521 C
                        59
                 LYS
                                  1.877 -14.689 -8.394 1.00 0.00
ATOM
        522
             0
                 LYS
                         59
                                  2.174 -14.018 -9.378
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        523 N
                 LEU
                         60
                                  0.662 -15.208 -8.190
                                                         1.00
                                                                0.00
        524 CA
ATOM
                 LEU
                         60
                                 -0.476 -15.080 -9.081
                                                         1.00
                                                                0.00
        525
             CB
                 LEU
ATOM
                         60
                                 -0.726 -13.620 -9.507
                                                         1.00
                                                                0.00
             CG
                 LEU
ATOM
        526
                         60
                                 -2.201 -13.328 -9.836
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        527
             CD1 LEU
                         60
                                 -2.358 -11.835 -10.147
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        528
            CD2 LEU
                         60
                                 -2.730 -14.146 -11.020
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        529
             C
                  LEU
                         60
                                 -0.271 -16.070 -10.226
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        530 0
                 LEU
                         60
                                 -0.019 -15.689 -11.368
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        531 N
                  ILE
                         61
                                 -0.376 -17.363 -9.899
                                                          1.00
                                                                0.00
                                                         1.00
ATOM
        532 CA
                 ILE
                         61
                                 -0.219 -18.438 -10.870
                                                                0.00
ATOM
        533
             CB
                 ILE
                         61
                                 -0.067 -19.796 -10.150
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        534
             CG2 ILE
                         61
                                 -0.165 -20.977 -11.127
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        535
             CG1
                 ILE
                                  1.291 -19.801 -9.422
                         61
                                                          1.00
                                                                0.00
             CD1 ILE
ATOM
        536
                         61
                                  1.549 -21.088 -8.637
                                                          1.00
                                                                0.00
             С
                  ILE
ATOM
        537
                         61
                                 -1.384 -18.359 -11.867
                                                          1.00
                                                                0.00
            0
                  ILE
ATOM
        538
                         61
                                - -2.495 -17.980 -11.498
                                                          1.00
                                                                0.00
             N
                  SER
ATOM
        539
                         62
                                 -1.108 -18.695 -13.134
                                                          1.00
                                                                0.00
            CA
                  SER
ATOM
        540
                         62
                                 -2.059 -18.647 -14.239
                                                          1.00
                                                                0.00
                  SER
ATOM
             CB
                         62
        541
                                 -1.281 -18.751 -15.561
                                                          1.00
                                                                0.00
             0G
                  SER
ATOM
        542
                         62
                                 -2.154 -18.646 -16.666
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        543
             С
                  SER
                         62
                                 -3.150 -19.717 -14.132
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        544 0
                  SER
                         62
                                 -3.194 -20.638 -14.948
                                                          1.00
                                                                0.00
        545 N
                  SER
                                                          1.00
ATOM
                         63
                                 -4.035 -19.570 -13.142
                                                                0.00
ATOM
        546 CA
                  SER
                         63
                                 -5.170 -20.443 -12.868
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        547
             CB
                  SER
                         63
                                 -6.121 -20.489 -14.075
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        548
             0G
                  SER
                         63
                                 -6.427 -19.178 -14.508
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        549
             C
                  SER
                         63
                                 -4.751 -21.847 -12.426
                                                          1.00
                                                                0.00
        550
             0
                  SER
ATOM
                         63
                                 -3.578 -22.216 -12.467
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        551
             N
                  ASP
                         64
                                 -5.743 -22.628 -11.993
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        552
             CA
                  ASP
                                 -5.576 -23.996 -11.531
                                                          1.00
                                                                0.00
                         64
ATOM
        553
             CB
                  ASP
                         64
                                 -6.778 -24.376 -10.655
                                                          1.00
                                                                0.00
             CG
                  ASP
ATOM
        554
                         64
                                 -6.961 -23.396 -9.504
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        555
             OD1 ASP
                         64
                                 -6.377 -23.666 -8.434
                                                          1.00
                                                                0.00
             OD2 ASP
ATOM
        556
                         64
                                 -7.657 -22.382 -9.723
                                                          1.00
                                                                0.00
             C
ATOM
        557
                  ASP
                         64
                                 -5.464 -24.945 -12.725
                                                          1.00
                                                                0.00
             0
                  ASP
ATOM
        558
                                 -5.628 -24.539 -13.875
                                                                0.00
                         64
                                                          1.00
ATOM
        559
             N
                  SER
                         65
                                 -5.188 -26.220 -12.443
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        560
             CA
                  SER
                         65
                                 -5.056 -27.293 -13.417
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             CB
                  SER
                                 -3.688 -27.228 -14.113
        561
                         65
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        562
             0G
                  SER
                         65
                                 -3.631 -26.145 -15.020
                                                          1.00
                                                                0.00
             C
                  SER
ATOM
        563
                         65
                                 -5.216 -28.618 -12.674
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         564
             0
                  SER
                         65
                                 -5.021 -28.669 -11.460
                                                          1.00
                                                                0.00
             N
                  GLU
ATOM
        565
                         66
                                 -5.568 -29.683 -13.406
                                                          1.00
                                                                0.00
             \mathsf{C}\mathsf{A}
                  GLU
ATOM
        566
                         66
                                 -5.737 -31.019 -12.847
                                                          1.00
                                                                0.00
              CB
                  GLU
ATOM
        567
                         66
                                 -6.219 -31.961 -13.959
                                                          1.00
                                                                0.00
              CG
ATOM
                  GLU
                         66
                                                                0.00
         568
                                  -6.575 -33.354 -13.432
                                                          1.00
              CD
                  GLU
ATOM
         569
                                  -7.205 -34.205 -14.529
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         66
ATOM
             OE1 GLU
                                 -8.435 -34.076 -14.709
         570
                         66
                                                          1.00
                                                                0.00
```

319 ATOM 571 OE2 GLU -6.446 -34.954 -15.181 1.00 0.00 66 ATOM 572 С GLU 66 -4.412 -31.474 -12.225 1.00 0 GLU -4.395 -32.042 -11.134 1.00 ATOM 573 66 N -3.313 -31.189 -12.928 1.00 **ATOM** 574 ASP 67 CA ASP -1.946 -31.473 -12.536 0.00 ATOM 575 67 1.00 CB -1.498 -32.814 -13.128 ATOM 576 ASP 67 1.00 0.00 ATOM 577 CG ASP 67 -0.052 -33.139 -12.767 1.00 0.00 OD1 ASP 0.246 -33.172 -11.553 ATOM 578 67 1.00 0.00 OD2 ASP 0.751 -33.316 -13.708 ATOM 579 67 1.00 0.00 0.00 С ASP -1.093 -30.310 -13.048 1.00 **ATOM** 580 67 **ATOM** OT1 ASP -1.463 -29.768 -14.114 1.00 0.00 581 67 OT2 ASP ATOM 582 67 -0.305 -29.783 -12.232 1.00 0.00 05' GUA ATOM 583 68 -6.968 -41.172 10.757 1.00 0.00 C5' GUA ATOM 584 68 -6.743 -41.861 9.547 1.00 0.00 C4' GUA -7.048 -40.954 1.00 ATOM 585 68 8.353 0.00 04' GUA 1.00 0.00 ATOM 586 68 -8.360 - 40.4298.430 C1' GUA -8.432 -39.352 7.523 1.00 0.00 ATOM 587 68 N9 GUA -9.579 -38.472 7.829 1.00 0.00 ATOM 588 68 ATOM 63 GUA -9.921 -37.919 9.033 1.00 0.00 589 68 N7 GUA -11.013 -37.209 9.004 1.00 0.00 ATOM 590 68 C5 GUA ATOM 591 -11.418 -37.276 7.674 1.00 0.00 68 ATOM 592 C6 GUA 68 -12.538 - 36.6807.017 1.00 0.00 ATOM 593 06 GUA -13.445 -36.014 7.515 1.00 0.00 68 GUA -12.537 -36.921 ATOM 594 N1 68 5.647 1.00 0.00 ATOM 595 C2GUA 68 -11.584 -37.669 4.984 1.00 0.00 N2596 GUA 68 -11.693 -37.795 3.661 1.00 0.00 ATOM N3GUA -10.550 -38.254 ATOM 597 68 5.602 1.00 0.00 ATOM **C4** GUA -10.522 -38.018 6.940 1.00 0.00 598 68 ATOM 599 C3' GUA 68 -6.136 -39.721 8.263 1.00 0.00 C2' GUA -7.113 -38.646 ATOM 600 68 7.772 1.00 0.00 **ATOM** 601 03' GUA 68 -5.080 -40.004 7.354 1.00 0.00 **ATOM** 602 P THY -3.948 -38.922 6.931 1.00 0.00 69 ATOM 603 OP1 THY 69 -3.591 - 38.1238.123 1.00 0.00 OP2 THY -2.894 -39.631 1.00 ATOM 604 69 6.174 0.00 05' THY ATOM 605 69 -4.732 -37.965 5.897 1.00 0.00 C5' THY ATOM 606 69 -5.427 -38.509 4.790 1.00 0.00 C4' THY ATOM 607 69 -6.428 -37.5074.202 1.00 0.00 04' THY -7.491 -37.094 5.026 1.00 0.00 ATOM 608 69 ATOM 609 C1' THY 69 -8.014 -35.895 4.504 1.00 0.00 ATOM N1 THY -8.879 -35.243 5.521 1.00 0.00 610 69 ATOM 60 THY -8.497 -35.252 6.841 1.00 0.00 611 69 ATOM 612 C5 THY 69 -9.250 -34.645 7.792 1.00 0.00 C7 THY -8.709 -34.685 9.210 1.00 **ATOM** 613 69 0.00 C4 THY -10.501 -33.990 7.464 1.00 0.00 ATOM 614 69 **ATOM** 615 04 THY 69 -11.244 -33.422 8.259 1.00 0.00 ATOM 616 N3 THY 69 -10.835 -34.0556.121 1.00 0.00 C2 ATOM 617 THY 69 -10.073 -34.642 5.121 1.00 0.00 02 THY -10.458 -34.615 ATOM 618 69 3.955 1.00 0.00 **ATOM** 619 C3' THY 69 -5.778 -36.207 3.714 1.00 0.00 ATOM 620 C2' THY 69 -6.719 -35.1284.264 1.00 0.00

```
321
                                                                    322
ATOM
        621
             03'
                 THY
                                  -5.664 -36.204
                                                    2.302 1.00 0.00
                         69
             P
ATOM
        622
                  THY
                         70
                                  -4.897 -35.013
                                                    1.535
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP1 THY
ATOM
        623
                         70
                                  -4.204 -35.567
                                                    0.349
                                                           1.00
                                                                  0.00
             OP2 THY
ATOM
        624
                         70
                                  -4.099 -34.288
                                                    2.541
                                                          1.00
                                                                  0.00
ATOM
        625
             05'
                  THY
                                  -6.079 -34.028
                         70
                                                    1.070 1.00
                                                                  0.00
ATOM
        626
             C5'
                  THY
                         70
                                  -7.104 -34.451
                                                    0.192 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        627
             C4'
                  THY
                         70
                                  -8.274 -33.463
                                                    0.264
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        628
             04'
                  THY
                         70
                                  -8.713 -33.312
                                                    1.599
                                                           1.00
                                                                  0.00
        629
             C1'
                  THY
                                  -9.404 -32.086
ATOM
                         70
                                                    1.693
                                                           1.00
                                                                  0.00
        630
             N1
                  THY
                                  -9.578 -31.690
ATOM
                         70
                                                    3.116
                                                           1.00
                                                                  0.00
             60
                  THY
ATOM
        631
                         70
                                  -8.536 -31.828
                                                    4.000
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        632
             C5
                  THY
                         70
                                  -8.691 -31.534
                                                    5.315
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        633
             C7
                  THY
                         70
                                  -7.470 -31.720
                                                    6.187
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        634
             C4
                  THY
                         70
                                  -9.951 -31.060
                                                    5.846
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  THY
                                                                  0.00
ATOM
        635
             04
                         70
                                 -10.158 -30.750
                                                    7.015 1.00
ATOM
        636
             N3
                  THY
                         70
                                 -10.960 -30.973
                                                    4.903
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  THY
             C2
ATOM
        637
                         70
                                 -10.823 -31.221
                                                    3.544
                                                            1.00
                                                                  0.00
        638
             02
                  THY
ATOM
                         70
                                 -11.755 -30.997
                                                    2.778
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  THY
        639
              C3'
                         70
                                  -7.937 -32.040
ATOM
                                                   -0.210
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        640
             C2'
                  THY
                                  -8.482 -31.146
                                                    0.919
                         70
                                                            1.00
                                                                  0.00
             03'
                  THY
ATOM
        641
                         70
                                  -8.577 -31.833
                                                   -1.458
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        642
             P
                  ADE
                         71
                                  -8.327 -30.524
                                                   -2.364
                                                            1.00
                                                                  0.00
             OP1 ADE
        643
                                  -6.915 -30.091
                                                   -2.223
                                                                  0.00
ATOM
                         71
                                                            1.00
ATOM
              OP2 ADE
                                  -8.885 -30.758
                                                   -3.710
                                                                  0.00
        644
                         71
                                                            1.00
              05'
                  ADE
ATOM
        645
                         71
                                  -9.226 -29.405
                                                   -1.642
                                                                  0.00
                                                            1.00
              C5'
                  ADE
ATOM
        646
                         71
                                 -10.639 - 29.405
                                                   -1.727
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C4'
ATOM
        647
                  ADE
                         71
                                 -11.227 -28.298
                                                   -0.839
                                                            1.00
                                                                  0.00
              04'
ATOM
        648
                  ADE
                                 -11.263 -28.679
                                                    0.537
                                                            1.00
                                                                  0.00
                         71
             C1'
                  ADE
                                 -10.964 -27.531
ATOM
        649
                         71
                                                    1.308
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        650
              N9
                  ADE
                         71
                                 -10.575 -27.797
                                                    2.713
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C8
                  ADE
                                  -9.419 -28.363
ATOM
        651
                         71
                                                            1.00
                                                                  0.00
                                                    3.185
ATOM
        652
              N7
                  ADE
                         71
                                  -9.290 -28.344
                                                    4.480
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        653
              C5
                  ADE
                                 -10.450 -27.714
                                                    4.906
                                                            1.00
                                                                  0.00
                         71
ATOM
        654
              C6
                  ADE
                         71
                                 -10.939 -27.378
                                                    6.181
                                                            1.00
                                                                  0.00
              N6
                  ADE
ATOM
        655
                         71
                                 -10.280 -27.696
                                                    7.296
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         656
              N1
                  ADE
                          71
                                 -12.115 -26.729
                                                    6.275
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         657
              C2
                  ADE
                                 -12.767 -26.424
                                                    5.153
                                                            1.00
                                                                  0.00
                          71
              N3
                  ADE
ATOM
         658
                          71
                                 -12.423 - 26.697
                                                    3.897
                                                            1.00
                                                                  0.00
                                 -11.235 -27.357
              C4
                  ADE
ATOM
         659
                          71
                                                     3.838
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C3'
                  ADE
                                 -10.385 -27.007
ATOM
         660
                          71
                                                   -0.888
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C2'
ATOM
                  ADE
                                  -9.767 -27.051
         661
                          71
                                                    0.506
                                                            1.00
                                                                  0.00
              03'
                  ADE
                                                            1.00
ATOM
         662
                          71
                                 -11.231 -25.894
                                                   -1.060
                                                                  0.00
         663
              P
                  GUA
                                 -10.680 -24.437
ATOM
                          72
                                                   -1.470
                                                            1.00
                                                                  0.00
              OP1 GUA
ATOM
         664
                          72
                                 -11.091 -24.136
                                                   -2.856
                                                            1.00
                                                                  0.00
              OP2 GUA
                                  -9.259 -24.286
ATOM
         665
                          72
                                                   -1.073
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
              05'
                  GUA
                          72
                                 -11.533 -23.523
                                                                  0.00
         666
                                                   -0.477
                                                            1.00
ATOM
              C5'
                  GUA
                                 -12.939 -23.426
                                                   -0.575
         667
                          72
                                                            1.00
                                                                   0.00
ATOM
         668
              C4'
                  GUA
                          72
                                 -13.430 -22.583
                                                    0.602
                                                                   0.00
                                                            1.00
ATOM
         669
              04'
                  GUA
                          72
                                 -13.140 -23.273
                                                    1.810
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
              C1' GUA
                                 -12.535 -22.399
         670
                          72
                                                    2.740 1.00 0.00
```

					(163)			特開2(
	323							324
ATOM	671	N9	GUA	72	-11.640 -23.144	3.658	1.00	0.00
ATOM	672	C8	GUA	72	-10.532 -23.889	3.339	1.00	0.00
ATOM	673	N7	GUA	72	-9.885 -24.362	4.366	1.00	0.00
ATOM	674	C5	GUA	72	-10.625 -23.914	5.455	1.00	0.00
ATOM	675 ·	<b>C6</b>	GUA	72	-10.417 -24.118	6.851	1.00	0.00
ATOM	676	06	GUA	72	-9.483 -24.701	7.396	1.00	0.00
ATOM	677	N1	GUA	72	-11.434 -23.577	7.629	1.00	0.00
ATOM	678	C2	GUA	72	-12.515 -22.882	7.123	1.00	0.00
ATOM	679	N2	GUA	72	-13.396 -22.386	7.994	1.00	0.00
ATOM	680	N3	GUA	72	-12.689 -22.647	5.814	1.00	0.00
ATOM	681	C4	GUA	72	-11.720 -23.196	5.032	1.00	0.00
ATOM	682	C3'	GUA	72	-12.670 -21.250	0.663	1.00	0.00
ATOM	683	C2'	GUA	72	-11.716 -21.488	1.833	1.00	0.00
ATOM	684	03'	GUA	72	-13.564 -20.180	0.868	1.00	0.00
ATOM	685	P	GUA	73	-13.052 -18.657	1.009	1.00	0.00
ATOM	686		GUA	73	-13.976 -17.781	0.260	1.00	0.00
ATOM	687		GUA	73	-11.596 -18.622		1.00	0.00
ATOM	688	05'	GUA	73	-13.287 -18.430		1.00	0.00
ATOM	689	C5'	GUA	73	-14.593 -18.538		1.00	0.00
ATOM	690	C4'	GUA	73	-14.587 -18.429		1.00	0.00
ATOM	691	04'	GUA	73	-13.687 -19.378		1.00	0.00
ATOM	692	C1'	GUA	73	-12.867 -18.746		1.00	0.00
ATOM	693	N9	GUA	73	-11.574 -19.453		1.00	0.00
ATOM	694	C8	GUA	73	-10.695 -19.765	5.276	1.00	0.00
ATOM	695	N7	GUA	73	-9.652 -20.442		1.00	0.00
ATOM	696	C5	GUA	73	-9.848 -20.587		1.00	0.00
ATOM	697	C6	GUA	73	-9.040 -21.248		1.00	0.00
ATOM	698	06	GUA	73	-7.972 -21.822		1.00	0.00
ATOM	699	N1	GUA	73	-9.595 -21.206		1.00	0.00
ATOM	700	C2	GUA	73	-10.789 -20.589		1.00	0.00
ATOM	701	N2	GUA	73	-11.173 -20.595		1.00	0.00
ATOM	702	N3	GUA	73	-11.544 -19.952		1.00	0.00
ATOM	703	C4	GUA	73	-11.022 -19.987		1.00	0.00
ATOM	704	C3'	GUA	73	-14.140 -17.053		1.00	0.00
ATOM	705	C2'	GUA	73	-12.701 -17.347		1.00	0.00
ATOM	706	03'	GUA	73	-14.972 -16.710		1.00	0.00
ATOM	707	P	GUA	74	-14.891 -15.287		1.00	0.00
ATOM	708		GUA	74	-16.258 -14.728		1.00	0.00
ATOM	709		GUA	74	-13.803 -14.483		1.00	0.00
ATOM	710	05'	GUA	74	-14.432 -15.734		1.00	0.00
ATOM	711	C5'	GUA	74	-15.289 -16.507		1.00	0.00
ATOM	712	C4'	GUA	74	-14.645 -16.805		1.00	0.00
ATOM	713	04'	GUA	74	-13.419 -17.496		1.00	0.00
ATOM	714	C1'	GUA	74	-12.357 -16.809		1.00	0.00
ATOM	715	N9	GUA	74	-11.130 -16.968		1.00	0.00
ATOM	716	C8	GUA	74	-10.949 -16.647		1.00	0.00
ATOM	717	N7	GUA	74	-9.808 -17.031		1.00	0.00
ATOM	718	C5	GUA		-9.179 -17.654		1.00	0.00
ATOM	719	C6	GUA	74	-7.925 -18.330		1.00	0.00
ATOM	720	06	GUA	74	-7.146 -18.543		1.00	

```
325
                                                                   326
ATOM
        721 N1
                 GUA
                         74
                                 -7.627 -18.794 10.887 1.00 0.00
ATOM
        722 C2
                 GUA
                         74
                                 -8.463 -18.677 11.978 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        723
            N2
                 GUA
                         74
                                 -8.025 -19.136
                                                  13.151
                                                         1.00
                                                                 0.00
ATOM
        724
             N3
                  GUA
                         74
                                 -9.664 -18.083
                                                 11.917 1.00
                                                                 0.00
             C4
                 GUA
ATOM
        725
                         74
                                 -9.965 -17.595
                                                  10.683
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        726
             C3'
                 GUA
                         74
                                 -14.313 -15.539
                                                  11.473 1.00
                                                                 0.00
        727
             C2'
                 GUA
                                -12.830 -15.359
ATOM
                         74
                                                  11.154
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        728
             03'
                 GUA
                         74
                                 -14.561 -15.793
                                                  12.845
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        729
             P
                  THY
                         75
                                 -14.326 -14.680
                                                  13.989
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        730
             0P1
                 THY
                                 -15.300 -14.920
                                                  15.077
                         75
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        731
             OP2 THY
                                 -14.245, -13.349
                                                  13.349
                         75
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        732
             05'
                 THY
                                 -12.860 -15.070
                                                  14.528
                                                           1.00
                         75
                                                                 0.00
                 THY
                                                                 0.00
ATOM
        733
             C5'
                         75
                                -12.650 -16.270
                                                  15.248
                                                           1.00
ATOM
        734
             C4'
                 THY
                         75
                                 -11.170 -16.420
                                                  15.601
                                                           1.00
                                                                 0.00
                 THY
                                                                 0.00
ATOM
        735
             04'
                         75
                                 -10.387 -16.440
                                                  14.421
                                                           1.00
ATOM
        736
             C1'
                  THY
                         75
                                 -9.141 -15.840
                                                  14.691
                                                           1.00
                                                                 0.00
             N1
                  THY
ATOM
        737
                         75
                                 -8.481 -15.452
                                                  13.413
                                                           1.00
                                                                 0.00
             63
                  THY
                                 -9.175 -14.727
ATOM
        738
                         75
                                                  12.471
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C5
                  THY
ATOM
        739
                         75
                                  -8.652 -14.483
                                                  11.244
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        740
             C7
                  THY
                                  -9.493 -13.656
                                                  10.289
                         75
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
                                                  10.864
ATOM
        741
             C4
                         75
                                  -7.351 - 14.989
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        742
             04
                  THY
                         75
                                  -6.824 -14.857
                                                   9.764
                                                                 0.00
                                                           1.00
             N3
                  THY
                         75
ATOM
        743
                                  -6.700 -15.674
                                                  11.873
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        744
             C2
                  THY
                         75
                                  -7.197 -15.929
                                                  13.141
                                                           1.00
                                                                 0.00
             02
                  THY
ATOM
        745
                         75
                                  -6.511 -16.543
                                                  13.954
                                                                 0.00
                                                           1.00
ATOM
        746
             C3'
                  THY
                         75
                                 -10.632 -15.255
                                                  16.447
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C2' THY
ATOM
        747
                         75
                                  -9.572 -14.637
                                                  15.528
                                                                 0.00
                                                           1.00
              03' THY
ATOM
        748
                         75
                                 -10.101 -15.783
                                                  17.649
                                                           1.00
                                                                 0.00
             P
                  THY
ATOM
        749
                         76
                                  -9.477 - 14.849
                                                  18.807
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OP1 THY
                                  -9.659 -15.534
                                                  20.107
ATOM
        750
                         76
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              OP2 THY
                         76
                                  -9.968 -13.464
                                                  18.626
        751
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         752
              05' THY
                                  -7.914 -14.882
                                                  18.435
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          76
                  THY
ATOM
         753
              C5'
                         76
                                  -7.168 -16.075
                                                   18.570
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C4'
                  THY
ATOM
         754
                          76
                                  -5.752 -15.867
                                                   18.039
                                                           1.00
                                                                 0.00
         755
              04'
                  THY
                                  -5.785 -15.539
                                                   16.662
ATOM
                          76
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C1'
                 THY
ATOM
         756
                          76
                                  -4.754 -14.618
                                                  16.394
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              N1
                  THY
                                  -4.977 -13.954
                                                  15.079
                                                           1.00
                                                                 0.00
         757
                          76
                  THY
ATOM
         758
              60
                          76
                                  -6.081 -13.158
                                                  14.876
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         759
              C5
                  THY
                          76
                                  -6.317 -12.574
                                                  13.676
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         760
              C7
                  THY
                         76
                                  -7.564 -11.714
                                                  13.596
                                                                 0.00
                                                           1.00
                  THY
ATOM
         761
              C4
                          76
                                  -5.424 -12.761
                                                  12.551
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         762
              04
                  THY
                                  -5.556 -12.256
                          76
                                                  11.441
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
         763
              N3
                          76
                                  -4.357 -13.603
                                                   12.816
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C2
                  THY
ATOM
         764
                          76
                                  -4.096 -14.226
                                                   14.027
                                                           1.00
                                                                 0.00
              02
                  THY
ATOM
         765
                          76
                                  -3.126 - 14.977
                                                   14.127
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              C3'
                  THY
                                  -5.020 -14.710
         766
                          76
                                                   18.737
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C2'
                  THY
ATOM
         767
                                  -4.868 -13.691
                                                   17.604
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          76
ATOM
              03'
                  THY
                                                   19.204
         768
                          76
                                  -3.779 -15.199
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         769
              P
                  ADE
                          77
                                  -2.780 -14.318
                                                   20.113
                                                                 0.00
                                                           1.00
ATOM
         770
              OP1 ADE
                          77
                                  -2.449 -15.093 21.329
                                                          1.00
                                                                 0.00
```

```
327
                                                                    328
ATOM
        771
             OP2 ADE
                         77
                                  -3.297 -12.938
                                                   20.225 1.00 0.00
             05'
                         77
                                  -1.492 -14.301
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        772
                 ADE
                                                   19.159
ATOM
        773
             C5'
                  ADE
                         77
                                  -0.786 - 15.498
                                                   18.918
                                                           1.00
                                                                  0.00
                         77
                                   0.242 - 15.290
                                                   17.813
ATOM
        774
             C4'
                  ADE
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        775
             04'
                  ADE
                         77
                                  -0.391 -14.836
                                                   16.629
                                                           1.00
                                                                  0.00
             C1'
                  ADE
                         77
                                   0.379 - 13.816
                                                   16.026
                                                           1.00
ATOM
        776
                                                                  0.00
              N9
                  ADE
                                  -0.520 -12.959
                                                   15.223
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        777
                         77
        778
             C8
                  ADE
                         77
                                  -1.691 -12.369
                                                   15.630
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        779
              N7
                  ADE
                                  -2.353 -11.770
                                                   14.681
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
                         77
        780
              C5
                  ADE
                         77
                                  -1.549 -11.956
                                                   13.562
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
ATOM
        781
              60
                  ADE
                         77
                                  -1.685 -11.559
                                                   12.218
                                                           1.00
                                                                  0.00
             N6
                  ADE
                                  -2.756 -10.892
                                                   11.789
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        782
                         77
ATOM
        783
              N1
                  ADE
                         77
                                  -0.696 -11.845
                                                   11.347
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C2
                  ADE
ATOM
        784
                         77
                                   0.358 - 12.525
                                                   11.797
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        785
              N3
                  ADE
                         77
                                   0.583 - 12.999
                                                   13.022
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C4
                  ADE
                                                   13.881
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        786
                         77
                                  -0.417 -12.661
ATOM
        787
              C3'
                  ADE
                         77
                                   1.321 -14.258
                                                   18.154
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C2'
                  ADE
                          77
                                   0.945 -13.086
                                                   17.242
                                                                  0.00
ATOM
         788
                                                            1.00
ATOM
         789
              03'
                 ADE
                          77
                                   2.551 -14.872
                                                   17.820
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         790
             P
                  GUA
                          78
                                   3.974 -14.314
                                                   18.313
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        791
              OP1 GUA
                          78
                                   3.828 -13.722
                                                   19.660
                                                            1.00
                                                                  0.00
              OP2 GUA
ATOM
         792
                          78
                                   4.978 -15.377
                                                   18.090
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         793
              05'
                  GUA
                          78
                                   4.222 -13.138
                                                   17.256
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C5'
                  GUA
                                                   15.898
ATOM
         794
                          78
                                   4.476 -13.425
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         795
              C4'
                  GUA
                          78
                                   4.500 -12.143
                                                   15.061
                                                            1.00
                                                                  0.00
              04'
                  GUA
                                   3.190 -11.771
                                                   14.671
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         796
                          78
ATOM
         797
              C1'
                  GUA
                          78
                                   3.196 -10.374
                                                   14.510
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         798
              N9
                  GUA
                          78
                                   1.833
                                           -9.836
                                                   14.313
                                                            1.00
                                                                  0.00
              С8
                  GUA
                          78
                                           -9.669
                                                   15.223
ATOM
         799
                                   0.822
                                                            1.00
                                                                  0.00
                  GUA
              N7
                                  -0.267
                                           -9.156
                                                   14.722
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         800
                          78
                                           -8.978
ATOM
         801
              C5
                  GUA
                          78
                                   0.036
                                                   13.376
                                                            1.00
                                                                  0.00
         802
                  GUA
                                  -0.762
                                           -8.467
                                                   12.309
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
              60
                          78
                                           -8.031
ATOM
         803
              06
                  GUA
                          78
                                  -1.910
                                                   12.355
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         804
              N1
                  GUA
                          78
                                  -0.098
                                           -8.494
                                                   11.088
                                                            1.00
                                                                  0.00
         805
              C2
                  GUA
                          78
                                    1.184
                                           -8.965
                                                   10.904
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
ATOM
         806
              N2
                  GUA
                          78
                                    1.684
                                           -8.933
                                                    9.667
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         807
              N3
                  GUA
                          78
                                    1.941
                                           -9.436
                                                   11.905
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         808
              C4
                  GUA
                          78
                                    1.312
                                          -9.415
                                                   13.113
                                                            1.00
                                                                  0.00
         809
              C3'
                  GUA
                                    5.069 -10.903
                                                   15.782
                                                                  0.00
ATOM
                          78
                                                            1.00
ATOM
         810
              C2'
                  GUA
                          78
                                    3.854
                                          -9.973
                                                   15.826
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         811
              03'
                  GUA
                          78
                                    6.092 - 10.351
                                                   14.981
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         812
              P
                   GUA
                          79
                                    7.163
                                           -9.299
                                                   15.558
                                                            1.00
                                                                  0.00
              OP1 GUA
         813
                          79
                                    6.575
                                           -8.605
                                                   16.724
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
              OP2 GUA
                          79
                                    8.438 -10.040
                                                   15.711
                                                                  0.00
ATOM
         814
                                                            1.00
                  GUA
ATOM
         815
              05'
                          79
                                    7.265
                                           -8.265
                                                   14.329
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C5'
                  GUA
                                           -8.672
                                                   13.059
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         816
                          79
                                    7.741
 ATOM
              C4'
                  GUA
                          79
                                    7.118
                                           -7.800
                                                   11.963
                                                            1.00
                                                                  0.00
         817
 ATOM
         818
              04'
                  GUA
                          79
                                    5.704
                                           -7.850
                                                   12.072
                                                            1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         819
              C1'
                   GUA
                          79
                                    5.168
                                           -6.564
                                                    11.844
                                                            1.00
                                                                  0.00
              N9
                   GUA
                                    3.840 - 6.428
 ATOM
         820
                          79
                                                   12.488 1.00
                                                                  0.00
```

	329								330	
ATOM	821	C8	GUA	79	3.507	-6.653	13.800	1.00	0.00	
ATOM	822	N7	GUA	79	2.260	-6.408	14.089	1.00	0.00	
ATOM	823	C5	GUA	79	1.718	-5.983	12.881	1.00	0.00	
ATOM	824	C6	GUA	79	0.394	-5.551	12.568	1.00	0.00	
ATOM	825	06	GUA	79	-0.574	-5.454	13.320	1.00	0.00	
		N1								
ATOM	826		GUA	79 70	0.243	-5.223	11.226	1.00	0.00	
ATOM	827	C2	GUA	79 70	1.255	-5.282	10.291	1.00	0.00	
ATOM	828	N2	GUA	79 70	0.976	-4.856	9.059	1.00	0.00	
ATOM	829	N3	GUA	79 70	2.504	-5.673	10.582	1.00	0.00	
ATOM	830	C4	GUA	79 70	2.672	-6.013	11.890	1.00	0.00	
ATOM	831	C3'	GUA	79 70	7.511	-6.316	12.050	1.00	0.00	
ATOM	832	C2'	GUA	79	6.206	-5.669	12.515	1.00	0.00	
ATOM	833	03'	GUA	79	7.921	-5.876	10.765	1.00	0.00	
ATOM	834	P	GUA	80	8.448	-4.374	10.487	1.00	0.00	
ATOM	835		GUA	80	9.440	-4.426	9.390	1.00	0.00	
ATOM	836		GUA	80	8.812	-3.748	11.777	1.00	0.00	
ATOM	837	05'	GUA	80	7.123	-3.645	9.931	1.00	0.00	
ATOM	838	C5'	GUA	80	6.596	-3.974	8.660	1.00	0.00	
ATOM	839	C4'	GUA	80	5.343	-3.147	8.367	1.00	0.00	
ATOM .	840	04'	GUA	80	4.347	-3.423	9.335	1.00	0.00	
ATOM	841	C1'	GUA	80	3.681	-2.225	9.659	1.00	0.00	
ATOM	842	N9	GUA	80	2.976	-2.343	10.954	1.00	0.00	
ATOM	843	C8	GUA	80	3.481	-2.708	12.175	1.00	0.00	
ATOM	844	N7	GUA	80	2.593	-2.759	13.128	1.00	0.00	
ATOM	845	C5	GUA	80	1.406	-2.404	12.495	1.00	0.00	
ATOM	846	C6	GUA	80	0.079	-2.310	13.013	1.00	0.00	
ATOM	847	06	GUA	80	-0.309	-2.517	14.161	1.00	0.00	
ATOM	848	N1	GUA	80	-0.843	-1.949	12.039	1.00	0.00	
ATOM	849	C2	GUA	80	-0.535	-1.697	10.719	1.00	0.00	
ATOM	850	N2	GUA	80	-1.532	-1.328	9.911	1.00	0.00	
ATOM	851	N3	GUA	80	0.710	-1.784	10.229	1.00	0.00	
ATOM	852	C4	GUA	80	1.631	-2.146	11.164	1.00	0.00	
ATOM	853	C3'	GUA	80	5.594	-1.632	8.445	1.00	0.00	
ATOM	854	C2'	GUA	80	4.839	-1.234	9.710	1.00	0.00	
ATOM	855	03'	GUA	80	5.041	-0.973	7.323	1.00	0.00	
ATOM	856	05'	CYT	81	-10.383	-0.629	13.364	1.00	0.00	
ATOM	857	C5'	CYT	81	-9.988	0.387	12.465	1.00	0.00	
ATOM	858	C4'	CYT	81	-8.704	-0.002	11.725	1.00	0.00	
ATOM	859	04'	CYT	81	-7.650	-0.280	12.623	1.00	0.00	
ATOM	860	. C1'	CYT	81	-6.662	-0.956	11.878	1.00	0.00	
ATOM	861	N1	CYT	81	-5.675	-1.639	12.751	1.00	0.00	
ATOM	862	C6	CYT	81	-6.097	-2.368	13.833	1.00	0.00	
ATOM	863	C5	CYT	81	-5.226	-3.050	14.612	1.00	0.00	
ATOM	864	C4	CYT	81	-3.835	-2.960	14.266	1.00	0.00	
ATOM	865	N4	CYT	81	-2.910	-3.597	14.986	1.00	0.00	
ATOM	866	N3	CYT	81	-3.434	-2.262	13.196	1.00	0.00	
ATOM	867	C2	CYT	81	-4.324	-1.604	12.405	1.00	0.00	
ATOM	868	02	CYT	81	-3.924	-1.009	11.407	1.00	0.00	
ATOM	869	C3'	CYT	81	-8.833	-1.281	10.886	1.00	0.00	
ATOM	870	C2'	CYT	81	-7.485	-1.973	11.100	1.00	0.00	

331 332 ATOM 871 03' CYT 81 -9.081-0.9389.532 1.00 0.00 P 872 82 -9.279-2.0518.377 1.00 0.00 ATOM CYT OP1 CYT -9.695 -3.3169.023 ATOM 873 82 1.00 0.00 OP2 CYT 82 -1.458 7.314 1.00 874 -10.119 0.00 ATOM ATOM 875 05' CYT 82 -7.786-2.255 7.793 1.00 0.00 C5' -7.144 - 1.2430.00 876 CYT 82 7.037 1.00 ATOM -1.708ATOM 877 C4' CYT 82 -5.7646.548 1.00 0.00 04' CYT 82 -4.918 -1.995 7.645 1.00 878 0.00 ATOM **ATOM** 879 C1' CYT 82 -4.163 -3.167 7.402 1.00 0.00 -3.922 -3.819 880 N1 CYT 82 8.712 1.00 0.00 ATOM -4.988 -4.020ATOM 881 C6-CYT 82 9.546 1.00 0.00 CYT -4.548882 C5 82 -4.84610.775 1.00 0.00 ATOM 883 C4 CYT 82 -3.513 -4.89811.177 1.00 0.00 ATOM N4 CYT -3.308 -5.476 82 12.360 1.00 0.00 ATOM 884 ATOM N3 CYT 82 -2.468-4.71310.357 1.00 0.00 885 C2 CYT 82 -2.637-4.185 9.108 1.00 0.00 ATOM 886 02 CYT -1.670 -4.051 8.361 ATOM 887 82 1.00 0.00 C3' CYT 82 -5.834 -2.9861.00 0.00 ATOM 888 5.703 **ATOM** C2' CYT -5.100 -4.021 6.548 1.00 0.00 889 82 03' CYT ATOM 890 82 -5.220 -2.7354.447 1.00 0.00 ATOM 891 P CYT 83 -5.274 -3.788 3.224 1.00 0.00 892 OP1 CYT -6.459-4.655 3.401 ATOM 83 1.00 0.00 ATOM 893 OP2 CYT 83 -5.093 -3.038 1.961 1.00 0.00 05' CYT -3.959-4.683 ATOM 894 83 3.472 1.00 0.00 ATOM 895 C5' CYT 83 -2.680 -4.260 3.037 1.00 0.00 896 C4' CYT -1.608 -5.217 ATOM 83 3.570 1.00 0.00 0.00 ATOM 897 04' CYT 83 -1.648-5.228 4.984 1.00 ATOM 898 C1' CYT 83 -1.025-6.4015.469 1.00 0.00 ATOM 899 N1 CYT 83 -1.748-6.8876.669 1.00 0.00 -6.933**ATOM** 900 60 CYT 83 -3.1156.646 1.00 0.00 ATOM 901 C5 CYT 83 -3.836-7.2527.744 1.00 0.00 C4CYT -3.093-7.5798.928 1.00 ATOM 902 83 0.00 0.00 ATOM 903 N4 CYT 83 -3.731-7.87110.063 1.00 N3CYT -1.754-7.635ATOM 904 83 8.913 1.00 0.00 905 C2 CYT -1.045 -7.3177.792 1.00 0.00 ATOM 83 02 CYT 0.178 -7.434 **ATOM** 906 7.781 1.00 0.00 83 C3' CYT -1.852 -6.678ATOM 907 83 3.179 1.00 0.00 908 C2' CYT -1.182 - 7.4134.337 1.00 ATOM 83 0.00 03' CYT -1.275-6.990ATOM 909 83 1.919 1.00 0.00 ATOM 910 P THY 84 -1.394 -8.460 1.240 1.00 0.00 ATOM OP1 THY -2.761 -8.9851.464 1.00 0.00 911 84 ATOM 912 OP2 THY 84 -0.874 -8.375 -0.1421.00 0.00 05' THY -0.370 -9.363 ATOM 913 84 2.097 1.00 0.00 ATOM 914 C5' THY 84 1.027 - 9.1242.070 1.00 0.00 C4' THY 1.731 - 9.9921.00 0.00 ATOM 915 84 3.118 04' THY 0.00 ATOM 916 84 1.136 - 9.8224.396 1.00 917 C1' THY 1.055 -11.064 5.065 1.00 0.00 ATOM 84 ATOM 918 N1 THY -0.015 -11.015 1.00 0.00 84 6.107 ATOM 919 60 THY 84 -1.309 -10.720 5.745 1.00 0.00 ATOM 920 C5 THY -2.299 -10.641 6.665 1.00 0.00

	333				(111)			334
ATOM	921	C7	THY	84	-3.689 -10.353	6.125	1.00	0.00
ATOM	922	C4	THY	84	-2.045 -10.849	8.073	1.00	0.00
ATOM	923	04	THY	84	-2.888 -10.787	8.959	1.00	0.00
ATOM	924	N3	THY	84	-0.723 -11.139	8.378	1.00	0.00
ATOM	925	C2	THY	84	0.316 -11.228	7.454	1.00	0.00
ATOM	926	02	THY	84	1.456 -11.478	7.837	1.00	0.00
ATOM	927	C3,	THY	84	1.644 -11.490	2.792	1.00	0.00
ATOM	928	C2'	THY	84	0.727 -12.008	3.905	1.00	0.00
ATOM	929	03'	THY	84	2.957 -12.026	2.812	1.00	0.00
ATOM	930	P	ADE	85	3.273 -13.555	2.413	1.00	0.00
ATOM	931		ADE	85	2.291 -13.999	1.400	1.00	0.00
ATOM	932		ADE	85	4.722 -13.691	2.144	1.00	0.00
ATOM	933	05'	ADE	85	2.952 -14.301	3.795	1.00	0.00
ATOM	934	C5'	ADE	85	3.738 -14.068	4.947	1.00	0.00
ATOM	935	C4'	ADE	85	3.104 -14.753	6.157	1.00	0.00
ATOM	936	04'	ADE	85	1.869 -14.180	6.530	1.00	0.00
ATOM	937	C1'	ADE	85	1.168 -15.164	7.259	1.00	0.00
ATOM	938	N9	ADE	85	-0.244 -14.774	7.436	1.00	0.00
ATOM	939	C8	ADE	85	-1.122 -14.317	6.485	1.00	0.00
ATOM	940	N7	ADE	85	-2.281 -13.952	6.956	1.00	0.00
ATOM	941	C5	ADE	85	-2.169 -14.203	8.319	1.00	0.00
ATOM	942	C6	ADE	85	-3.051 -14.020	9.400	1.00	0.00
ATOM	943	N6	ADE	85	-4.273 -13.511	9.241	1.00	0.00
ATOM	944	N1	ADE	85	-2.648 -14.386	10.631	1.00	0.00
ATOM	945	C2	ADE	85	-1.435 -14.911	10.780	1.00	0.00
ATOM	946	N3	ADE	85	-0.505 -15.116	9.853	1.00	0.00
ATOM	947	C4	ADE	85	-0.941 -14.732	8.621	1.00	0.00
ATOM	948	C3'	ADE	85	2.782 -16.229	5.895	1.00	0.00
ATOM	949	C2'	ADE	85	1.319 -16.357	6.327	1.00	0.00
ATOM	950	03'	ADE	85	3.669 -17.005	6.666	1.00	0.00
ATOM	951	P	ADE	86	3.734 -18.599	6.535	1.00	0.00
ATOM	952	0P1	ADE	86	2.875 -19.005	5.398	1.00	0.00
ATOM	953	0P2	ADE	86	5.163 -18.986	6.555	1.00	0.00
ATOM	954	05'	ADE	86	3.036 -19.081	7.897	1.00	0.00
ATOM	955	C5'	ADE	86	3.644 -18.802	9.139	1.00	0.00
ATOM	956	C4'	ADE	86	2.673 -19.021	10.291	1.00	0.00
ATOM	957	04'	ADE	86	1.459 -18.329	10.076	1.00	0.00
ATOM	958	C1'	ADE	86	0.382 -19.127	10.518	1.00	0.00
ATOM	959	N9	ADE	86	-0.844 -18.680	9.821	1.00	0.00
ATOM	960	С8	ADE	86	-1.036 -18.536	8.469	1.00	0.00
ATOM	961	N7	ADE	86	-2.167 -17.981	8.140	1.00	0.00
ATOM	962	C5	ADE	86	-2.783 -17.759	9.363	1.00	0.00
ATOM	963	C6	ADE	86	-4.018 -17.184	9.710	1.00	0.00
ATOM	964	N6	ADE	86	-4.861 -16.712	8.791	1.00	0.00
ATOM	965	N1	ADE	86	-4.330 -17.066	11.014	1.00	0.00
ATOM	966	C2	ADE	86	-3.461 -17.499	11.922	1.00	0.00
ATOM	967	N3	ADE	86	-2.268 -18.056	11.730	1.00	0.00
ATOM	968	C4	ADE	86	-1.983 -18.168	10.401	1.00	0.00
ATOM	969	C3'		86	2.308 -20.495	10.512	1.00	0.00
ATOM	970	C2'	ADE	86	0.835 -20.526	10.103	1.00	0.00

335 336 2.520 -20.738 11.888 1.00 0.00 ATOM 971 03' ADE 86 Р 87 2.451 -22.187 12.569 1.00 0.00 ATOM 972 CYT ATOM 973 OP1 CYT 87 3.388 -22.166 13.717 1.00 0.00 OP2 CYT 87 2.605 -23.211 11.515 1.00 0.00 ATOM 974 ATOM 975 05' CYT 87 0.949 -22.217 13.140 1.00 0.00 C5' CYT 14.265 ATOM 976 87 0.609 - 21.4301.00 0.00 C4' CYT -0.904 -21.276 14.421 ATOM 977 87 1.00 0.00978 04' CYT -1.499 -20.831 13.224 ATOM 87 1.00 0.00 C1' CYT -2.871 -21.146 13.292 ATOM 979 87 1.00 0.00 N1 CYT -3.480 -21.085 11.939 ATOM 980 87 1.00 0.00 60 CYT -2.792 -21.558 10.850 ATOM 981 87 1.00 0.001.00 C5 CYT -3.247 - 21.3769.591 0.00 ATOM 982 87 983 C4 CYT 87 -4.482 -20.665 9.443 1.00 0.00 ATOM N4 CYT 87 -4.930 -20.351 8.230 0.00 **ATOM** 984 1.00 ATOM 985 N3 CYT 87 -5.178 -20.256 10.513 1.00 0.00 C2 .CYT -4.717 -20.464 ATOM 986 87 11.775 1.00 0.00 **ATOM** 987 02 CYT 87 -5.388 -20.090 12.735 1.00 0.00 C3' CYT 87 -1.651 -22.556 14.811 ATOM 988 1.00 0.00 ATOM 989 C2' CYT 87 -2.836 -22.565 13.842 1.00 0.00 03' CYT ATOM 990 87 -2.035 -22.428 16.172 1.00 0.00 P ATOM 991 CYT 88 -2.773 -23.608 16.993 1.00 0.00 OP1 CYT ATOM 992 88 -2.574 -23.343 18.435 1.00 0.00 ATOM 993 OP2 CYT 88 -2.355 -24.904 16.417 1.00 0.00 05' CYT -4.332 -23.373 16.644 ATOM 994 88 1.00 0.00 ATOM 995 C5' CYT 88 -5.042 -22.260 17.158 1.00 0.00 C4' CYT -6.411 -22.129 ATOM 996 88 16.482 1.00 0.00 ATOM 997 04' CYT 88 -6.261 -21.981 15.087 1.00 0.00 1.00 ATOM 998 C1' CYT 88 -7.436 -22.441 14.455 0.00 CYT **ATOM** 999 N1 88 -7.121 -22.800 13.054 1.00 0.00 63 CYT 12.789 ATOM 1000 88 -6.002 -23.544 1.00 0.00 1001 -5.618 -23.835 ATOM C5 CYT 88 11.532 1.00 0.00 **ATOM** CYT -6.443 -23.325 1002 C4 10.476 1.00 0.00 88 **ATOM** 1003 N4 CYT -6.089 -23.508 9.206 1.00 0.00 88 ATOM 1004 N3 CYT 88 -7.574 -22.657 10.739 1.00 0.00 ATOM 1005 C2 CYT 88 -7.957 -22.391 12.019 1.00 0.00 ATOM 1006 02 CYT 88 -9.024 -21.819 12.230 1.00 0.00 **ATOM** C3' CYT -7.325 -23.351 1007 88 16.672 1.00 0.00 **ATOM** 1008 C2' CYT 88 -7.763 -23.697 15.250 1.00 0.00 ATOM 1009 03' CYT -8.393 -22.977 17.527 1.00 88 0.00 ATOM 1010 P CYT -9.625 -23.956 17.888 1.00 0.00 OP1 CYT ATOM 1011 89 -9.199 -25.357 17.664 1.00 0.00 ATOM 1012 OP2 CYT -10.165 -23.552 19.204 1.00 0.00 05' CYT 1013 -10.713 -23.576 16.759 ATOM 89 1.00 0.00 C5' CYT ATOM 1014 89 -11.329 -22.299 16.731 1.00 0.00 -12.295 -22.195 ATOM 1015 C4' CYT 89 15.545 1.00 0.00 **ATOM** 04' CYT -11.594 -22.413 1016 89 14.338 1.00 0.00 ATOM 1017 C1' CYT 89 -12.420 -23.086 13.411 1.00 0.00 CYT ATOM 1018 N1 89 -11.544 -23.872 12.506 1.00 0.00 ATOM 1019 60 CYT -10.543 -24.630 13.051 1.00 0.00 C5 CYT -9.629 -25.262 ATOM 1020 89 12.290 1.00 0.00

	337								338
ATOM	1021	C4	CYT	89	-9.761	-25.112	10.868	1.00	0.00
ATOM	1022	N4	CYT	89		-25.701	10.048	1.00	0.00
ATOM	1023	N3	CYT	89	-10.770		10.333	1.00	0.00
ATOM	1024	C2	CYT	89	-11.690		11.123	1.00	0.00
ATOM	1025	02	CYT	89	-12.627		10.607	1.00	0.00
ATOM	1026	C3'	CYT	89	-13.418		15.594	1.00	0.00
ATOM	1027	C2'	CYT	89	-13.243		14.291	1.00	0.00
ATOM	1028	03'	CYT	89		-22.578	15.698	1.00	0.00
ATOM	1029	P	THY	90	-16.072		15.830	1.00	0.00
ATOM	1030		THY	90	-15.817		16.453	1.00	0.00
ATOM	1031		THY	90		-22.447		1.00	0.00
ATOM	1032	05'		90	-16.483		14.291	1.00	0.00
ATOM	1033	C5'	THY	90		-22.519	13.435	1.00	0.00
ATOM	1033	C4'	THY	90	-16.896		11.986	1.00	0.00
ATOM	1035	04'	THY	90	-15.688		11.565	1.00	0.00
ATOM	1036	C1'	THY	90		-24.509	10,525	1.00	0.00
ATOM	1037	N1	THY	90		-25.442	10.334	1.00	0.00
ATOM	1038	C6	THY	90		-26.092	11.420	1.00	0.00
ATOM	1039	C5	THY	90		-26.882	11.298	1.00	0.00
ATOM	1040	C7	THY	90		-27.563	12.565	1.00	0.00
ATOM	1041	C4	THY	90		-27.071	10.022	1.00	0.00
ATOM	1041	04	THY	90		-27.759	9.835	1.00	0.00
ATOM	1042	N3	THY	90		-26.393	8.973	1.00	0.00
ATOM	1044	C2	THY	90		-25.607	9.060	1.00	0.00
ATOM	1045	02	THY	90		-25.115	8.047	1.00	0.00
ATOM	1046	C3'	THY	90		-24.069	11.777	1.00	0.00
ATOM	1047	C2'	THY	90		-25.207	11.078	1.00	0.00
ATOM	1048	03'	THY	90		-23.506	10.990	1.00	0.00
ATOM	1049	P	ADE	91		-24.279	10.697	1.00	0.00
ATOM	1050		ADE	91		-23.274	10.297	1.00	0.00
ATOM	1051		ADE	91		-25.197	11.823	1.00	0.00
ATOM	1052	05'	ADE	91		-25.166	9.407	1.00	0.00
ATOM	1053	C5'	ADE	91		-24.572	8.136	1.00	0.00
ATOM	1054	C4'	ADE	91		-25.587	7.147	1.00	0.00
ATOM	1055	04'	ADE	91		-26.009	7.539	1.00	0.00
ATOM	1056	C1'	ADE	91		-27.198	6.834	1.00	0.00
ATOM	1057	N9	ADE	91		-27.915	7.464	1.00	0.00
ATOM	1058	С8	ADE	91		-28.165	8.796	1.00	0.00
ATOM	1059	N7	ADE	91		-28.798	9.072	1.00	0.00
ATOM	1060	C5	ADE	91		-29.002	7.818	1.00	0.00
ATOM	1061	C6	ADE	91		-29.626	7.394	1.00	0.00
ATOM	1062	N6	ADE	91		-30.147	8.251	1.00	0.00
ATOM	1063	N1	ADE	91	-13.295	-29.711	6.072	1.00	0.00
ATOM	1064	C2	ADE	91		-29.184	5.218	1.00	0.00
ATOM	1065	N3	ADE	91		-28.548	5.488	1.00	0.00
ATOM	1066	C4	ADE	91		-28.490	6.827	1.00	0.00
ATOM	1067	C3'		91		-26.884	7.028	1.00	0.00
ATOM	1068	C2'	ADE	91	-19.022	-27.973	7.021	1.00	0.00
ATOM	1069	03'	ADE	91	-20.877	-26.812	5.844	1.00	0.00
ATOM	1070	P	ADE	92	-21.787	-28.033	5.307	1.00	0.00

					(171)				特開200	3-135087
	339								340	
ATOM	1071	0P1	ADE	92	-22.162 -	-28.889	6.453	1.00	0.00	
ATOM	1072	0P2	ADE	92	-22.837 -	-27.472	4.429	1.00	0.00	
ATOM	1073	05'	ADE	92	-20.747 -	-28.848	4.385	1.00	0.00	
ATOM	1074	C5'	ADE	92	-20.138 -	-28.243	3.259	1.00	0.00	
ATOM	1075	C4'	ADE	92	-19.124 -	-29.200	2.628	1.00	0.00	
ATOM	1076	04'	ADE	92	-18.091 -	-29.504	3.553	1.00	0.00	
ATOM	1077	C1'	ADE	92	-17.735 -	-30.863	3.414	1.00	0.00	
ATOM	1078	N9	ADE	92	-17.054	-31.341	4.639	1.00	0.00	
ATOM	1079	<b>C8</b>	ADE	92	-17.499 -	-31.272	5.935	1.00	0.00	
ATOM	1080	N7	ADE	92	-16.663	-31.734	6.822	1.00	0.00	
ATOM	1081	C5	ADE	92	-15.580	-32.148	6.056	1.00	0.00	
ATOM	1082	C6	ADE	92	-14.347	-32.742	6.389	1.00	0.00	
ATOM	1083	N6	ADE	92	-14.010	-33.014	7.651	1.00	0.00	
ATOM	1084	N1	ADE	92	-13.488	-33.051	5.401	1.00	0.00	
ATOM	1085	C2	ADE	92	-13.841	-32.787	4.145	1.00	0.00	
ATOM	1086	N3	ADE	92	-14.965	-32.232	3.699	1.00	0.00	
ATOM	1087	C4	ADE	92	-15.809	-31.925	4.721	1.00	0.00	
ATOM	1088	C3'	ADE	92	-19.756	-30.544	2.231	1.00	0.00	
ATOM	1089	C2'	ADE	92	-19.111	-31.500	3.238	1.00	0.00	
ATOM	1090	03'	ADE	92	-19.416	-30.833	0.885	1.00	0.00	
ATOM	1091	P	CYT	93	-20.047	-32.086	0.086	1.00	0.00	
ATOM	1092	0P1	CYT	93	-21.095	-32.712	0.921	1.00	0.00	
ATOM	1093	0P2	CYT	93	-20.363	-31.651	-1.292	1.00	0.00	
ATOM	1094	05'	CYT	93	-18.800	-33.096	0.023	1.00	0.00	
ATOM	1095	C5'	CYT	93	-17.709	-32.864	-0.847	1.00	0.00	
ATOM	1096	C4'	CYT	93	-16.635	-33.920	-0.590	1.00	0.00	
ATOM	1097	04'	CYT	93	-16.261	-33.858	0.768	1.00	0.00	
ATOM	1098	C1'	CYT	93	-15.807	-35.125	1.180	1.00	0.00	
ATOM	1099	N1	CYT	93	-15.957	-35.232	2.652	1.00	0.00	
ATOM	1100	C6	CYT	93	-17.099	-34.781	3.264	1.00	0.00	
ATOM	1101	C5	CYT	93	-17.260	-34.845	4.604	1.00	0.00	
ATOM	1102	C4	CYT	93	-16.172	-35.398	5.359	1.00	0.00	
ATOM	1103	N4	CYT	93	-16.211	-35.420	6.693	1.00	0.00	
ATOM	1104	N3	CYT	93	-15.068	-35.855	4.755	1.00	0.00	
ATOM	1105	C2	CYT	93	-14.930	-35.795	3.402	1.00	0.00	
ATOM	1106	02	CYT	93	-13.912	-36.231	2.871	1.00	0.00	
ATOM	1107	C3'	CYT	93	-17.141	-35.354	-0.805	1.00	0.00	
ATOM	1108		CYT	93	-16.752	-36.097	0.472	1.00	0.00	
ATOM	1109	03'	CYT	93	-16.518	-35.942	-1.927	1.00	0.00	
END										
HEADER	0,000	000								
REMARK 0.000		0.0	0526	1.63149	0.0248	2 0.01	763 1	.94553	1.59368	
REMARK		2.9	0550	0.26365	0.6199	4 1.23	983 0	.78208		
REMARK	(	0.0	1033	0.00557	0.0085	1 0.01	677 0	.00901		
REMARK			122	120		2	0	0	0	

					(172)				特開200
	341								342
REMARK		1	378	305	460	27	3	340	
DEMARK		0.00	170	0 14070	0.00040	0.0400		070	0.11100
REMARK		0.03	3472	0.14379	0.03043	0.0462	9 0.	14379	0.14182
DEMINA		0.00	3000	0.00000					
REMARK		0.00	JUUU	0.00000					
DEHADY			^	٥	0		^	^	0
REMARK	0		0	0	0		0	0	0
ATOM	1	N	GLU	1	10.037 -21	308 3	0.149	1.00	0.00
ATOM	2	CA	GLU	1	8.804 -21		0.652	1.00	0.00
ATOM	3	СВ	GLU	1	8.752 -23		0.240	1.00	0.00
ATOM	4	CG	GLU	1	7.396 -24		0.537	1.00	0.00
ATOM	5	CD	GLU	1	7.464 -25		0.269	1.00	0.00
ATOM	6	0E1		1	8.085 -26		21.110	1.00	0.00
ATOM	7		GLU	1	6.924 -25		9.223	1.00	0.00
ATOM	8	C	GLU	1	8.692 -21		22.160	1.00	0.00
ATOM	9	0	GLU	1	8.418 -20		2.550	1.00	0.00
ATOM	10	N	LYS	2	8.914 -22		23.001	1.00	0.00
ATOM	11	CA	LYS	2	8.849 -22		24.453	1.00	0.00
ATOM	12	СВ	LYS	2	9.156 -23		25.080	1.00	0.00
ATOM	13	CG	LYS	2	9.263 -23		26.614	1.00	0.00
ATOM	14	CD	LYS	2	7.975 -23		27.292	1.00	0.00
ATOM	15	CE	LYS	2	8.105 -23		28.815	1.00	0.00
ATOM	16	NZ	LYS	2	6.888 -23		29.508	1.00	0.00
ATOM	17	C	LYS	2	9.817 -21		24.933	1.00	0.00
ATOM	18	0	LYS	2	9.419 -20		25.640	1.00	0.00
ATOM	19	N	HIS	3	11.089 -21		24.540	1.00	0.00
ATOM	20	CA	HIS	3	12.133 -20		24.900	1.00	0.00
ATOM	21	СВ	HIS	3	13.492 -21		24.874	1.00	0.00
ATOM	22	CG	HIS	3	13.563 -22		25.842	1.00	0.00
ATOM	23		HIS	3	14.049 -22		27.135	1.00	0.00
ATOM	24		HIS	3	13.969 -23		27.720	1.00	0.00
ATOM	25		HIS	3	13.465 -24		26.914	1.00	0.00
ATOM	26		HIS	3	13.211 -23		25.727	1.00	0.00
ATOM	27	С	HIS	3	12.066 -19		23.959	1.00	
ATOM	28	0	HIS	3 -	12.976 -19	.234 2	23.164	1.00	0.00
ATOM	29	N	ARG	4	10.970 -18	3.692	24.066	1.00	0.00
ATOM	30	CA	ARG	4	10.660 -17	.496 2	23.286	1.00	0.00
ATOM	31	CB	ARG	4	11.771 -16	.432 2	23.379	1.00	0.00
ATOM	32	CG	ARG	4	12.061 -16	5.021 2	24.830	1.00	0.00
ATOM	33	CD	ARG	4	13.245 -15	.051 2	24.920	1.00	0.00
ATOM	34	NE	ARG	4	12.981 -13	3.793	24.207	1.00	0.00
ATOM	35	CZ	ARG	4	13.873 -12	2.801 2	24.040	1.00	0.00
ATOM	36		ARG	4	13.531 -11		23.342	1.00	
ATOM	37		ARG	4	15.101 -12		24.568	1.00	
ATOM	38	C	ARG	4	10.319 -17		21.831	1.00	
ATOM	39	0	ARG	4	10.654 -18		21.333	1.00	
ATOM	40	N	ALA	5	9.642 -16		21.143	1.00	
ATOM	41	CA	ALA	5	9.242 -17		19.754	1.00	
ATOM	42	CB	ALA	5	7.937 -17	.876	19.665	1.00	0.00

343 ATOM 43 C ALA 5 5 18.511 ATOM 44 0 ALA 10.111 -15.230 1.00 0.00 ATOM N ARG 6 7.981 -15.036 19.238 1.00 0.00 45 ATOM CA ARG 6 7.710 - 13.71118.693 1.00 0.00 46 ATOM 47 CB ARG 6 8.462 -12.629 19.492 1.00 0.00 ATOM CG ARG 8.354 -12.799 21.020 1.00 0.00 48 6 ATOM 49 CD ARG 6 7.915 -11.508 21.724 1.00 0.00 ATOM NE ARG 6 6.565 -11.104 21.313 1.00 0.00 50 ATOM CZ ARG 6 5.419 -11.752 21.573 1.00 0.00 51 **ATOM** NH1 ARG 6 5.376 -12.745 22.473 1.00 0.00 NH2 ARG 20.909 ATOM 6 4.319 -11.384 1.00 0.00 53 8.031 -13.667 ATOM 54 C ARG 6 17.194 1.00 0.00 0 ARG 16.715 ATOM 55 6 8.626 -12.703 1.00 0.00 N 7 ATOM LYS 7.643 - 14.72016.455 1.00 0.00 CA LYS 7 7.877 -14.841 15.019 ATOM 57 1.00 0.00 0.00 CBLYS 7 9.393 -14.985 14.770 ATOM 58 1.00 CG LYS 7 13.392 ATOM 9.821 -14.452 1.00 0.00 59 CDLYS 7 ATOM 60 11.099 -15.136 12.886 1.00 0.00 ATOM CE LYS 7 10.814 -16.390 12.042 1.00 0.00 61 LYS **ATOM** 62 NZ 7 9.964 -17.377 12.735 1.00 0.00 ATOM C LYS 7 7.148 -16.027 14.352 1.00 0.00 63 0 LYS 7 ATOM 7.392 -16.273 13.170 1.00 0.00 64 ATOM N ARG 6.289 -16.779 15.061 1.00 0.00 65 8 **ATOM** CAARG 8 5.568 -17.947 14.540 1.00 0.00 66 CBARG 4.517 -17.532 13.496 ATOM 67 8 1.00 0.00 ATOM CG ARG 8 3.645 -16.367 13.970 1.00 0.00 68 ATOM 69 CD ARG 2.478 -16.112 13.012 1.00 0.00 8 ATOM 70 NE ARG 8 1.382 -17.073 13.215 1.00 0.00 ATOM 71 CZARG 8 0.070 -16.778 13.153 1.00 0.00 ATOM 72 NH1 ARG -0.853 -17.701 13.433 0.00 8 1.00 ATOM 73 NH2 ARG 8 -0.348 -15.558 12.817 1.00 0.00  $\mathbb{C}$ ATOM 74 ARG 8 6.501 - 19.03113.966 1.00 0.00 ATOM 75 0 ARG 8 7.722 -18.862 13.914 1.00 0.00 N ATOM 76 GLN 5.932 -20.153 13.506 1.00 0.00 9 CA GLN 6.686 -21.238 0.00 ATOM 77 9 12.892 1.00 6.015 -22.590 **ATOM** 78 CB GLN 13.181 1.00 0.00 9 ATOM CGGLN 79 9 6.908 -23.778 12.792 1.00 0.00 ATOM CD GLN 6.148 -25.098 12.896 80 9 1.00 0.00 ATOM 81 OE1 GLN 9 5.914 -25.769 11.893 1.00 0.00 **ATOM** 82 NE2 GLN 9 5.762 -25.478 14.114 1.00 0.00 C 6.784 - 20.92111.398 ATOM 83 GLN 9 1.00 0.00 **ATOM** 84 0 GLN 9 6.198 -21.605 10.559 1.00 0.00 **ATOM** 85 N ALA 10 7.530 -19.861 11.069 1.00 0.00 ATOM 86 CA ALA 10 7.723 - 19.4139.697 1.00 0.00 8.603 -18.162 ATOM 87 CB ALA 10 9.669 1.00 0.00 C ATOM 88 ALA 10 8.326 -20.524 8.836 1.00 0.00 ATOM 89 0 ALA 9.119 -21.330 9.321 10 1.00 0.0090 N TRP 7.937 -20.564 1.00 0.00 ATOM 11 7.560 ATOM 91 CA TRP 11 8.405 -21.561 6.607 1.00 0.00 ATOM 92 CB TRP 7.421 -21.631 5.433 1.00 0.00 11

	345							346
ATOM	93	CG	TRP	11	6.102 -22.282	5.739	1.00	0.00
ATOM	94	CD1		11	5.160 -21.825	6.596	1.00	0.00
ATOM	95	NE1		11	4.083 -22.688	6.620	1.00	0.00
ATOM	96	CE2		11	4.281 -23.757	5.769	1.00	0.00
ATOM	97	CZ2		11	3.511 -24.884	5.434	1.00	0.00
ATOM	98	CH2		11	4.007 -25.806	4.515	1.00	0.00
ATOM	99	CZ3		11	5.265 -25.603	3.927	1.00	0.00
	100		TRP		6.033 -24.473		1.00	0.00
ATOM				11	5.564 -23.521	4.263		
ATOM	101		TRP	11		5.192	1.00	0.00
ATOM	102	C	TRP	11	9.838 -21.277	6.137	1.00	0.00
ATOM	103	0	TRP	11	10.324 -20.151	6.232	1.00	0.00
ATOM	104	N	LEU	12	10.503 -22.321	5.626	1.00	0.00
ATOM	105	CA	LEU	12	11.866 -22.312	5.101	1.00	0.00
ATOM	106	CB	LEU	12	12.810 -22.895	6.167	1.00	0.00
ATOM	107	CC	LEU	12	14.293 -22.978		1.00	0.00
ATOM	108		LEU	12	14.894 -21.596		1.00	0.00
ATOM	109		LEU	12	15.087 -23.647	6.884	1.00	0.00
ATOM	110	C	LEU	12	11.860 -23.151	3.820	1.00	0.00
ATOM	111	0	LEU	12	10.982 -23.997	3.666	1.00	0.00
ATOM	112	N	TRP	13	12.811 -22.929		1.00	0.00
ATOM	113	CA	TRP	13	12.870 -23.657		1.00	0.00
ATOM	114	CB	TRP	13	14.052 -23.257		1.00	0.00
ATOM	115	CG	TRP	13	15.386 -23.309		1.00	0.00
ATOM	116		TRP	13	16.034 -22.202	1.793	1.00	0.00
ATOM	117		TRP	13	17.235 -22.524	2.388	1.00	$0.00 \\ 0.00$
ATOM	118 119		TRP TRP	13 13	17.415 -23.894 18.444 -24.714	2.415 2.901	1.00	0.00
ATOM Atom	120		TRP	13	18.329 -26.107	2.776	1.00	0.00
ATOM	121		TRP	13	17.192 -26.664	2.166	1.00	0.00
ATOM	122		TRP	13	16.166 -25.833	1.679	1.00	0.00
ATOM	123		TRP	13	16.245 -24.427		1.00	0.00
ATOM	124	C	TRP	13	12.847 -25.169		1.00	0.00
ATOM	125	0	TRP	13	12.489 -25.806		1.00	0.00
ATOM	126	N	GLU	14	13.201 -25.798	2.884	1.00	0.00
ATOM	127	CA	GLU	14	13.087 -27.251	2.884	1.00	0.00
ATOM	128	СВ	GLU	14	13.730 -27.863	4.136	1.00	0.00
ATOM	129	CG	GLU	14	13.478 -29.375	4.244	1.00	0.00
ATOM	130	CD	GLU	14	13.806 -30.133	2.959	1.00	0.00
ATOM	131		GLU	14	12.903 -30.852	2.476	1.00	0.00
ATOM	132		GLU	14	14.948 -29.970	2.481	1.00	0.00
ATOM	133	C	GLU	14	11.604 -27.575	2.725	1.00	0.00
ATOM	134	0	GLU	14	11.200 -28.249	1.777	1.00	0.00
ATOM	135	N	GLU	15	10.800 -27.031	3.637	1.00	0.00
ATOM	136	CA	GLU	15	9.362 -27.172	3.622	1.00	0.00
ATOM	137	CB	GLU	15	8.796 -26.418	4.833	1.00	0.00
ATOM	138	CG	GLU	15	9.330 -26.969	6.160	1.00	0.00
ATOM	139	CD	GLU	15	8.517 -26.432	7.327	1.00	0.00
ATOM	140		GLU	15	8.579 -25.205	7.563	1.00	0.00
ATOM	141	0E2	C GLU	15	7.801 -27.246	7.951	1.00	0.00
ATOM	142	C	GLU	15	8.802 -26.618	2.307	1.00	0.00

	347				(-, -,				348
ATOM	143	0	GLU	15	0 152	-27.333	1.550	1.00	348 0.00
ATOM	143		ASP	16		-25.334			0.00
	144		ASP					1.00	
ATOM				16		-24.635	0.855	1.00	0.00 $0.00$
ATOM	146		ASP	16		-23.169		1.00	
ATOM	147		ASP	16		-22.233	0.882	1.00	0.00
ATOM	148	OD1		16		-21.843	1.993	1.00	0.00
ATOM	149	OD2		16		-21.905	-0.225	1.00	0.00
ATOM	150	C	ASP	16		-25.282	-0.458	1.00	0.00
ATOM	151	0	ASP	16		-25.611	-1.283	1.00	0.00
ATOM	152	N	LYS	17		-25.442	-0.675	1.00	0.00
ATOM	153		LYS	17		-26.006	-1.909	1.00	0.00
ATOM	154	CB	LYS	17		-25.904	-1.981	1.00	0.00
ATOM	155	CG	LYS	17		-26.135	-3.418	1.00	0.00
ATOM	156	CD	LYS	17		-26.146	-3.460	1.00	0.00
ATOM	157	CE	LYS	17		-26.402	-4.875	1.00	0.00
ATOM	158	NZ	LYS	17		-27.746	-5.376	1.00	0.00
ATOM	159	C	LYS	17		-27.420	-2.108	1.00	0.00
ATOM	160	0	LYS	17		-27.731	-3.199	1.00	0.00
ATOM	161	N	ASN	18		-28.273	-1.071	1.00	0.00
ATOM	162	CA	ASN	18	9.763	-29.624	-1.203	1.00	0.00
ATOM	163	CB	ASN	18		-30.580	-0.107	1.00	0.00
ATOM	164	CG	ASN	18	9.453	-30.694	1.178	1.00	0.00
ATOM	165	OD1	ASN	18	8.230	-30.625	1.151	1.00	0.00
ATOM	166	ND2	ASN	18	10.112	-30.964	2.306	1.00	0.00
ATOM	167	С	ASN	18	8.246	-29.609	-1.448	1.00	0.00
ATOM	168	0	ASN	18	7.750	-30.457	-2.185	1.00	0.00
ATOM	169	N	LEU	19	7.509	-28.648	-0.870	1.00	0.00
ATOM	170	CA	LEU	19	6.066	-28.514	-1.057	1.00	0.00
ATOM	171	CB	LEU	19	5.490	-27.440	-0.121	1.00	0.00
ATOM	172	CG	LEU	19	3.980	-27.206	-0.289	1.00	0.00
ATOM	173		LEU	19	3.189	-28.488	-0.018	1.00	0.00
ATOM	174	CD2	LEU	19		-26.110	0.679	1.00	0.00
ATOM	175	С		19	5.764	-28.164	-2.510	1.00	0.00
ATOM	176	0	LEU	19		-28.819	-3.142	1.00	0.00
ATOM	177	N	ARG	20		-27.130	-3.035	1.00	0.00
ATOM	178	CA	ARG	20		-26.665	-4.407	1.00	0.00
ATOM	179	CB	ARG	20		-25.536	-4.686	1.00	0.00
ATOM	180	CG	ARG	20		-24.264	-3.885	1.00	0.00
ATOM	181	CD	ARG	20		-23.298	-3.917	1.00	0.00
ATOM	182	NE	ARG	20	8.005	-22.220	-2.923	1.00	0.00
ATOM	183	CZ	ARG	20		-20.983	-3.012	1.00	0.00
ATOM	184		ARG	20		-20.577	-4.103	1.00	0.00
ATOM	185		ARG	20		-20.148	-1.979	1.00	0.00
ATOM	186	C	ARG	20	6.487	-27.849	-5.353	1.00	0.00
ATOM	187	0	ARG	20		-28.130	-6.200	1.00	0.00
ATOM	188	N	SER	21		-28.553	-5.184	1.00	0.00
ATOM	189	CA	SER	21		-29.732	-5.976	1.00	0.00
ATOM	190	CB	SER	21		-30.285	-5.560	1.00	0.00
ATOM	191	OG	SER	21		-29.317	-5.791	1.00	0.00
ATOM	192	C	SER	21	6.831	-30.784	-5.803	1.00	0.00

```
349
                                                                  350
                                                         1.00 0.00
ATOM
        193 0
                 SER
                        21
                                  6.378 -31.365 -6.785
                        22
        194
             N
                 GLY
                                  6.400 -31.018 -4.560
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
                         22
        195 CA
                 GLY
                                  5.364 -31.970 -4.197
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        196
             C
                 GLY
                         22
                                  4.084 -31.745
                                                 -4.994
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
                 GLY
        197 0
                         22
                                  3.611 -32.659
                                                 -5.661
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
                 VAL
ATOM
        198
             N
                         23
                                  3.523 -30.534 -4.937
                                                          1.00
                                                                0.00
             CA
                 VAL
                         23
                                  2.306 -30.194
                                                 -5.661
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        199
                 VAL
                                                          1.00
ATOM
        200
             CB
                         23
                                  1.860 -28.760
                                                 -5.326
                                                                0.00
             CG1 VAL
        201
                         23
                                  0.662 - 28.354
                                                 -6.195
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        202 CG2 VAL
                         23
                                  1.448 -28.655
                                                 -3.854
                                                         1.00
ATOM
                                                                0.00
             C
                 VAL
                         23
                                  2.522 -30.373 -7.162 1.00
                                                                0.00
ATOM
        203
        204
             0
                 VAL
                         23
                                  1.671 -30.928 -7.850
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
                 ARG
        205 N
                         24
                                  3.656 -29.902 -7.683
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        206
             CA
                 ARG
                         24
                                  3.946 -29.999 -9.106
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
                 ARG
        207
             CB
                         24
                                  5.147 -29.097 -9.416
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
ATOM
        208
             CG
                 ARG
                         24
                                  5.177 -28.659 -10.887
                                                          1.00
                                                                0.00
             CD
                 ARG
                                  6.224 -27.561 -11.122
                                                                0.00
ATOM
        209
                         24
                                                         1.00
                                                          1.00
             NE
                 ARG
                                  6.013 -26.395 -10.247
ATOM
        210
                         24
                                                                0.00
ATOM
        211
             CZ
                 ARG
                         24
                                  5.061 -25.455 -10.389
                                                          1.00
                                                               0.00
             NH1 ARG
                                  4.246 -25.456 -11.451
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        212
                         24
ATOM
             NH2 ARG
                                  4.923 -24.511 -9.449
                                                          1.00
                                                                0.00
        213
                         24
             C
                  ARG
                                   4.148 -31.448 -9.579
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        214
                         24
ATOM
        215
             0
                  ARG
                                  3.873 -31.756 -10.737
                                                          1.00
                                                                0.00
                         24
                                   4.633 -32.333
ATOM
        216
             N
                  LYS
                         25
                                                 -8.700
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                   4.916 -33.733
                                                  -8.995
ATOM
        217
             CA
                 LYS
                         25
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CB
                  LYS
                                   6.113 -34.173
                                                  -8.130
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        218
                         25
             CG
                 LYS
                         25
                                   6.719 -35.540
                                                 -8.491
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        219
         220
             CD
                 LYS
                         25
                                   7.893 -35.473 -9.481
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
         221
             CE
                 LYS
                         25
                                   7.518 -34.828 -10.819
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         222
             NZ
                  LYS
                         25
                                   8.587 -34.986 -11.822
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C
                  LYS
                                                 -8.788
ATOM
         223
                         25
                                   3.714 -34.660
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         224
             0
                  LYS
                         25
                                   3.537 -35.599
                                                  -9.560
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         225
              N
                  TYR
                                   2.917 -34.431
                                                  -7.738
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         26
                 TYR
                                                  -7.358
                                                                 0.00
ATOM
             CA
                         26
                                   1.789 - 35.280
                                                          1.00
         226
ATOM
         227
              CB
                  TYR
                         26
                                   2.024 -35.757
                                                  -5.916
                                                          1.00
                                                                 0.00
         228
              CG TYR
                         26
                                   3.449 -36.220
                                                  -5.668
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
         229
              CD1 TYR
                                   3.999 -37.262
                                                  -6.437
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         26
              CE1 TYR
                                   5.325 -37.673
                                                  -6.222
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         230
                         26
ATOM
         231
              CZ TYR
                         26
                                   6.106 -37.049
                                                  -5.235
                                                          1.00
                                                                 0.00
              OH TYR
                                   7.395 -37.446
                                                 -5.035
ATOM
         232
                         26
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                   5.559 -36.010
                                                  -4.465
                                                                 0.00
ATOM
         233
              CE2 TYR
                         26
                                                          1.00
ATOM
              CD2 TYR
                                   4.234 -35.599
                                                  -4.680
                                                           1.00
                                                                 0.00
         234
                         26
ATOM
         235
              C
                  TYR
                         26
                                   0.412 - 34.626
                                                  -7.506
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                  -7.293
ATOM
         236
              0
                  TYR
                         26
                                  -0.592 -35.304
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  GLY
                                                  -7.864
                                                                 0.00
ATOM
         237
              N
                          27
                                   0.356 - 33.338
                                                          1.00
         238
              \mathsf{C}\mathsf{A}
                  GLY
                                  -0.879 -32.584
                                                  -8.039
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
                         27
              C
                  GLY
                                                                 0.00
         239
                         27
                                  -1.293 -31.888
                                                  -6.741
                                                          1.00
 ATOM
         240
              0
                  GLY
                                  -0.752 -32.180
                                                  -5.675
                                                                 0.00
 ATOM
                         27
                                                           1.00
 ATOM
         241
              N
                  GLU
                          28
                                  -2.263 -30.969
                                                  -6.830
                                                          1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         242
             CA GLU
                          28
                                  -2.789 -30.245 -5.677 1.00 0.00
```

					(111)			I I I I I I I
	351							352
ATOM	243	CB	GLU	28	-3.361 -28.888	-6.129	1.00	0.00
ATOM	244	CG	GLU	28	-3.564 -27.945	-4.935	1.00	0.00
ATOM	245	CD	GLU	28	-3.937 -26.514	-5.315	1.00	0.00
MOTA	246	0E1		28	-3.431 -26.005	-6.341	1.00	0.00
MOTA	247	0E2		28	-4.691 -25.898	-4.529	1.00	0.00
ATOM	248	C	GLU	28	-3.818 -31.147	-4.983	1.00	0.00
ATOM	249	0	GLU	28	-4.315 -32.090	-5.597	1.00	0.00
ATOM	250	N	GLY	29	-4.127 -30.894	-3.707	1.00	0.00
ATOM	251	CA	GLY	29	-5.067 -31.724	-2.959	1.00	0.00
ATOM	252	C	GLY	29	-4.484 -33.125	-2.788	1.00	0.00
ATOM	253	0	GLY	29	-5.143 -34.121	-3.074	1.00	0.00
ATOM	254	N	ASN	30	-3.226 -33.171	-2.340	1.00	0.00
ATOM	255	CA	ASN	30	-2.423 -34.367	-2.119	1.00	0.00
MOTA	256	CB	ASN	30	-1.635 -34.674	-3.412	1.00	0.00
ATOM	257	CG	ASN	30	-2.435 -35.399	-4.498	1.00	0.00
ATOM	258	0D1	ASN	30	-2.328 -36.616	-4.641	1.00	0.00
ATOM	259		ASN		-3.203 -34.678		1.00	0.00
ATOM	260	C	ASN	30	-1.474 -34.031	-0.962	1.00	0.00
ATOM	261	0	ASN	30	-0.278 -34.288	-1.035	1.00	0.00
ATOM	262	N	TRP	31	-1.995 -33.421	0.105	1.00	0.00
ATOM	263	CA	TRP	31	-1.223 -32.970	1.257	1.00	0.00
ATOM	264	СВ	TRP	31	-2.067 -31.987	2.077	1.00	0.00
ATOM	265	CG	TRP	31	-2.782 -31.019	1.189	1.00	0.00
ATOM	266		TRP	31	-4.120 -30.887	1.064	1.00	0.00
ATOM	267		TRP	31	-4.403 -29.917	0.123	1.00	0.00
ATOM	268		TRP	31	-3.250 -29.378	-0.405	1.00	0.00
ATOM	269		TRP	31	-3.006 -28.396	-1.375	1.00	0.00
ATOM	270		TRP	31	-1.681 -28.070	-1.695	1.00	0.00
ATOM	271		TRP	31	-0.620 -28.723	-1.053	1.00	0.00
ATOM	272		TRP	31	-0.874 -29.708	-0.086	1.00	0.00
ATOM	273		TRP	31	-2.195 -30.062	0.262	1.00	0.00
ATOM	274	C	TRP	31	-0.665 -34.132	2.065	1.00	0.00
ATOM	275	0	TRP	31	0.518 -34.133	2.393	1.00	0.00
ATOM	276	N	SER	. 32	-1.500 -35.126	2.364	1.00	0.00
ATOM	277	CA	SER	32	-1.075 -36.316	3.093	1.00	0.00
ATOM	278	CB	SER	32	-2.290 -37.211	3.335	1.00	0.00
ATOM	279	OG	SER	32	-1.924 -38.394	4.014	1.00	0.00
ATOM	280	С	SER	32	0.004 -37.038	2.282	1.00	0.00
ATOM	281	0	SER	32	1.053 -37.415	2.202	1.00	0.00
ATOM	282	N	LYS	33	-0.253 -37.207	0.984	1.00	
ATOM	283	CA	LYS	33				0.00
ATOM			LYS		0.656 -37.841	0.045	1.00	0.00
	284	CB		33	-0.044 -37.853	-1.316	1.00	0.00
ATOM	285	CG	LYS	33	0.701 -38.597	-2.428	1.00	0.00
ATOM	286	CD	LYS	33	-0.133 -38.431	-3.699	1.00	0.00
ATOM	287	CE N7	LYS	33	0.397 -39.178	-4.924 -6.112	1.00	0.00
ATOM	288	NZ C	LYS	33	-0.410 -38.829	-6.113	1.00	0.00
ATOM	289	C	LYS	33	2.001 -37.098	0.054	1.00	0.00
ATOM	290	0 N	LYS	33 34	3.049 -37.720 1.977 -35.769	0.227	1.00	0.00
ATOM	291	N CA	ILE	34 34		-0.108	1.00	0.00
ATOM	292	CA	ILE	34	3.169 -34.927	-0.087	1.00	0.00

```
353
                                                                  354
                                                         1.00 0.00
ATOM
        293 CB ILE
                        34
                                  2.794 -33.463
                                                 -0.399
             CG2 ILE
                                                                0.00
                        34
                                  3.932 -32.498
                                                 -0.032
                                                         1.00
ATOM
        294
            CG1 ILE
                         34
                                  2.478 - 33.322
                                                 -1.899
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        295
             CD1 ILE
                                  1.696 -32.046
        296
                        34
                                                 -2.230
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        297
            С
                 ILE
                         34
                                  3.906 - 35.092
                                                  1.246
                                                        1.00
                                                                0.00
ATOM
            0
ATOM
        298
                 ILE
                         34
                                  5.125 -35.229
                                                  1.245 1.00
                                                                0.00
        299 N
                 LEU
                         35
                                  3.179 -35.095
                                                  2.371 1.00
                                                                0.00
ATOM
                 LEU
                                  3.736 -35.269
                                                   3.708
ATOM
        300 CA
                         35
                                                         1.00
                                                                0.00
                 LEU
             CB
                         35
                                  2.613 -35.132
                                                   4.750
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        301
                 LEU
ATOM
        302
             CG
                         35
                                  3.033 - 35.402
                                                   6.204
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        303
             CD1 LEU
                         35
                                  4.133 -34.447
                                                   6.682
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        304
             CD2 LEU
                         35
                                  1.805 -35.247
                                                   7.108
                                                         1.00
                                                                0.00
             С
                                  4.483 -36.603
                                                   3.803 1.00
                                                                0.00
ATOM
        305
                 LEU
                         35
             0
ATOM
        306
                 LEU
                         35
                                  5.546 -36.674
                                                   4.417 1.00
                                                                0.00
                 LEU
                                                                0.00
             N
                         36
                                  3.946 - 37.662
                                                   3.185 1.00
ATOM
        307
ATOM
        308
             CA
                 LEU
                         36
                                  4.594 -38.966
                                                   3.185
                                                         1.00
                                                                0.00
                 LEU
             CB
                                  3.624 -40.054
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        309
                         36
                                                   2.701
ATOM
        310
             CG
                 LEU
                         36
                                  2.486 -40.332
                                                   3.699
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
             CD1 LEU
                         36
                                  1.363 -41.101
                                                   2.994 1.00
                                                                0.00
        311
             CD2 LEU
                                  2.971 -41.153
                                                   4.902
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        312
                         36
ATOM
        313
             C
                 LEU
                                  5.863 -38.918
                                                   2.327
                                                          1.00
                                                                0.00
                         36
ATOM
        314
             0
                  LEU
                                  6.891 -39.459
                                                   2.732
                                                         1.00
                                                                0.00
                         36
                                  5.804 -38.279
ATOM
        315
             N
                 HIS
                         37
                                                   1.151
                                                          1.00
                                                                0.00
                                  6.951 -38.170
ATOM
        316
             CA
                 HIS
                         37
                                                   0.255
                                                          1.00
                                                                0.00
                                  6.548 -37.532
                                                  -1.081
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        317
             CB
                 HIS
                         37
             CG HIS
                                  5.657 -38.391
                                                  -1.937
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        318
                         37
             ND1 HIS
                                  6.040 -39.641
                                                  -2.399
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        319
                         37
             CE1 HIS
                                  5.022 -40.126
                                                  -3.130
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        320
                         37
ATOM
             NE2 HIS
                                  3.985 -39.288
                                                  -3.192
                                                          1.00
                                                                0.00
         321
                         37
ATOM
             CD2 HIS
                                  4.395 -38.193
                                                  -2.435
                                                          1.00
                                                                0.00
         322
                         37
ATOM
             С
                  HIS
                         37
                                  8.096 -37.370
                                                   0.879
                                                          1.00
                                                                0.00
         323
ATOM
         324
             0
                  HIS
                         37
                                  9.214 -37.873
                                                   0.968
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         325
             N
                  TYR
                         38
                                  7.824 - 36.124
                                                   1.283
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         326
              CA
                  TYR
                         38
                                  8.798 - 35.208
                                                   1.860
                                                          1.00
                                                                0.00
              CB
                  TYR
                                  8.990 -34.012
                                                   0.918
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         327
                         38
              CG TYR
                         38
                                  9.113 -34.370
                                                  -0.556
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         328
              CD1 TYR
                                  8.284 -33.747
                                                  -1.511
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         329
                         38
                                                                0.00
              CE1 TYR
                                  8.396 -34.089
                                                  -2.870
                                                          1.00
ATOM
         330
                         38
ATOM
         331
              CZ TYR
                         38
                                  9.330 -35.054
                                                  -3.279
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         332
             OH TYR
                         38
                                  9.422 -35.387
                                                  -4.597
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         333
              CE2 TYR
                         38
                                  10.160 -35.675
                                                  -2.332
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CD2 TYR
                                  10.053 -35.332
                                                  -0.972 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         334
                         38
ATOM
         335
              C
                  TYR
                         38
                                   8.313 -34.759
                                                   3.237
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              0
                  TYR
                         38
                                   7.138 -34.444
                                                   3.407 1.00
                                                                 0.00
         336
ATOM
         337
              N
                  LYS
                         39
                                   9.217 - 34.741
                                                   4.221
                                                          1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         338
              CA LYS
                         39
                                   8.901 -34.360
                                                   5.589 1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         339
              CB
                  LYS
                         39
                                   9.898 - 35.021
                                                   6.551
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CG
                                   9.792 - 36.550
 ATOM
         340
                  LYS
                         39
                                                   6.472 1.00
                                                                 0.00
                          39
 ATOM
         341
              CD
                 LYS
                                  10.711 -37.210
                                                   7.505
                                                          1.00
                                                                0.00
 ATOM
         342
             CE LYS
                                  10.595 -38.737
                                                   7.411 1.00 0.00
                         39
```

255				(=)			356
	N/7	ı vc	20	11 467 -20 41	5 0 207	1 00	
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
				5.987 -31.71	0 4.839	1.00	0.00
351			40	5.668 -31.68	3.471	1.00	0.00
352	CZ	PHE	40	5.792 -30.49	2.740	1.00	0.00
353	CE2	PHE	40	6.239 -29.33	3.382	1.00	0.00
354	CD2	PHE	40	6.557 -29.35	3 4.745	1.00	0.00
355	C	PHE	40	8.423 -30.87	75 8.811	1.00	0.00
356	0	PHE	40	8.615 -31.88	9.495	1.00	0.00
357	N	ASN	41	8.379 -29.64	9.333	1.00	0.00
358	CA	ASN	41	8.548 -29.37	3 10.756	1.00	0.00
359	CB	ASN	41	8.698 -27.86	0 10.976	1.00	0.00
360	CG	ASN	41	8.926 -27.51		1.00	0.00
	OD1	ASN				1.00	0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
							0.00
392	CA	5ER	45	-2.863 -31.16	5.717	1.00	0.00
	352 353 354 355 356 357 358	343 NZ 344 C 345 O 346 N 347 CA 348 CB 349 CG 350 CD1 351 CE1 352 CZ 353 CE2 354 CD2 355 C 356 O 357 N 358 CA 359 CB 360 CG 361 OD1 362 ND2 363 C 364 O 365 N 366 CA 367 CB 368 CG 369 OD1 370 ND2 371 C 372 O 373 N 374 CA 375 CB 376 CG 377 CD 378 NE 379 CZ 380 NH1 381 NH2 382 C 383 O 384 N 385 CA 386 CB 387 CC2 388 OG1 389 C 389 OD1	343       NZ       LYS         344       C       LYS         345       O       LYS         346       N       PHE         347       CA       PHE         348       CB       PHE         350       CD1       PHE         351       CE1       PHE         352       CZ       PHE         353       CE2       PHE         355       C       PHE         356       O       PHE         357       N       ASN         359       CB       ASN         360       CG       ASN         361       OD1       ASN         362       ND2       ASN         363       C       ASN         364       O       ASN         365       N       ASN         366       CA       ASN         367       CB       ASN         368       CG       ASN         370       ND2       ASN         371       C       ASR         372       CD       ARG         377       CD       ARG	343         NZ         LYS         39           344         C         LYS         39           345         O         LYS         39           346         N         PHE         40           347         CA         PHE         40           348         CB         PHE         40           349         CG         PHE         40           350         CD1         PHE         40           351         CE1         PHE         40           352         CZ         PHE         40           353         CE2         PHE         40           354         CD2         PHE         40           355         C         PHE         40           356         O         PHE         40           357         N         ASN         41           358         CA         ASN         41           360         O         PHE         40           357         N         ASN         41           369         CB         ASN         41           360         CG         ASN         41           361 <td>343 NZ LYS 39</td> <td>343         NZ         LYS         39         11.467         -39.415         8.387           344         C         LYS         39         8.865         -32.838         5.757           345         O         LYS         39         9.278         -32.089         4.871           346         N         PHE         40         8.353         -32.402         6.914           347         CA         PHE         40         6.789         -30.531         6.950           349         CG         PHE         40         6.789         -30.511         6.950           350         CDI         PHE         40         5.987         -31.710         4.839           351         CEI         PHE         40         5.668         -31.686         3.471           352         CZ         PHE         40         6.239         -29.330         3.382           354         CD2         PHE         40         6.577         29.330         3.382           355         C         PHE         40         8.615         -31.881         9.495           355         C         PHE         40         8.615         -31.881         9.4</td> <td>343         NZ         LYS         39         11.467         -39.415         8.387         1.00           344         C         LYS         39         8.865         -32.838         5.757         1.00           345         O         LYS         39         9.278         -32.089         4.871         1.00           346         N         PHE         40         8.353         -32.009         7.301         1.00           348         CB         PHE         40         6.789         -30.531         6.950         1.00           350         CDI         PHE         40         6.434         -30.540         5.479         1.00           351         CEI         PHE         40         5.987         -31.710         4.839         1.00           352         CZ         PHE         40         5.992         -30.494         2.740         1.00           353         CE2         PHE         40         6.239         -29.330         3.382         1.00           355         C         PHE         40         6.557         -29.353         4.745         1.00           355         C         PHE         40         8.</td>	343 NZ LYS 39	343         NZ         LYS         39         11.467         -39.415         8.387           344         C         LYS         39         8.865         -32.838         5.757           345         O         LYS         39         9.278         -32.089         4.871           346         N         PHE         40         8.353         -32.402         6.914           347         CA         PHE         40         6.789         -30.531         6.950           349         CG         PHE         40         6.789         -30.511         6.950           350         CDI         PHE         40         5.987         -31.710         4.839           351         CEI         PHE         40         5.668         -31.686         3.471           352         CZ         PHE         40         6.239         -29.330         3.382           354         CD2         PHE         40         6.577         29.330         3.382           355         C         PHE         40         8.615         -31.881         9.495           355         C         PHE         40         8.615         -31.881         9.4	343         NZ         LYS         39         11.467         -39.415         8.387         1.00           344         C         LYS         39         8.865         -32.838         5.757         1.00           345         O         LYS         39         9.278         -32.089         4.871         1.00           346         N         PHE         40         8.353         -32.009         7.301         1.00           348         CB         PHE         40         6.789         -30.531         6.950         1.00           350         CDI         PHE         40         6.434         -30.540         5.479         1.00           351         CEI         PHE         40         5.987         -31.710         4.839         1.00           352         CZ         PHE         40         5.992         -30.494         2.740         1.00           353         CE2         PHE         40         6.239         -29.330         3.382         1.00           355         C         PHE         40         6.557         -29.353         4.745         1.00           355         C         PHE         40         8.

357 358 ATOM 393 CB SER 45 -3.914 -32.272 5.578 1.00 0.00 0G SER -4.665 -32.373 6.774 1.00 0.00 ATOM 394 45 ATOM 395 C SER 45 -3.430 -29.761 5.474 1.00 0.00 ATOM 396 0 SER 45 -3.221 - 29.1744.412 1.00 0.00 ATOM 397 N VAL 46 -4.119 -29.218 6.488 1.00 0.00 VAL -4.688 -27.878 6.476 1.00 CA 0.00ATOM 398 46 399 CBVAL 46 -5.381 -27.584 7.823 1.00 0.00 ATOM CG1 VAL -5.925 -26.152 7.869 1.00 0.00 ATOM 400 46 CG2 VAL -6.545 -28.544 8.093 1.00 0.00 ATOM 401 46 C VAL -3.567 -26.869 6.203 1.00 0.00 **ATOM** 402 46 403 0 VAL 46 -3.651 -26.099 5.254 1.00 0.00 ATOM N MET -2.521 -26.882 7.038 1.00 0.00 ATOM 404 47 ATOM 405 CA MET 47 -1.372 -25.991 6.936 1.00 0.00 1.00 -0.467 -26.2770.00 ATOM 406 CB MET 47 8.141 ATOM 407 CG MET 47 0.875 -25.551 8.123 1.00 0.00 MET 0.884 - 23.8117.627 1.00 0.00 ATOM 408 SD 47 ATOM 409 CE MET 47 -0.196 -23.095 8.878 1.00 0.00 C MET -0.678 - 26.0755.571 1.00 0.00**ATOM** 410 47 0 MET 47 -0.347 - 25.0504.975 1.00 0.00 ATOM 411 ATOM 412 N LEU 48 -0.465 -27.284 5.052 1.00 0.00 ATOM 413 CA LEU 0.159 - 27.4823.751 1.00 0.0048 CBLEU 0.317 - 28.9843.482 1.00 0.00 ATOM 414 48 ATOM 415 CG LEU 48 1.468 - 29.5454.327 1.00 0.00 1.268 -31.014 0.00 ATOM CD1 LEU 48 4.684 1.00 416 ATOM CD2 LEU 2.799 -29.427 3.583 1.00 0.00 417 48 C -0.672 -26.790 1.00 0.00 ATOM 418 LEU 48 2.670 ATOM 419 0 LEU 48 -0.127 -26.0821.818 1.00 0.00 -1.998 -26.9731.00 0.00 N LYS 2.718 ATOM 420 49 CA LYS -2.895 -26.365 1.780 1.00 0.00 ATOM 421 49 2.025 CBLYS 49 -4.265 -27.000 1.00 0.00 ATOM 422 ATOM 423 CG LYS 49 -5.285 -26.651 0.954 1.00 0.00 -5.672 -25.179 1.00 0.00 CDLYS 49 1.088 ATOM 424 CE -7.152 -25.030 0.842 1.00 0.00 ATOM 425 LYS 49 NZ LYS -7.497 -25.313 -0.5671.00 0.00 ATOM 426 49 ATOM 427 C LYS 49 -2.846 - 24.8421.943 1.00 0.00 0 LYS -2.756 -24.139 0.944 1.00 0.00 ATOM 428 49 **ASP** -2.900 -24.327 3.180 1.00 0.00 ATOM 429 N 50 **ATOM** 430 CA ASP 50 -2.862 -22.895 3.469 1.00 0.00 CBASP 50 -2.822 -22.621 4.979 1.00 0.00 **ATOM** 431 ATOM 432 CG ASP 50 -4.092 -23.019 5.707 1.00 0.00-3.977 -23.363 6.902 1.00 0.00 ATOM 433 OD1 ASP 50 OD2 ASP -5.169 -22.928 5.076 1.00 0.00 ATOM 434 50 0.00 C ASP -1.645 -22.2452.827 1.00 ATOM 435 50 0 ASP -1.777 -21.242 2.127 1.00 0.00 ATOM 436 50 N ARG -0.461 - 22.8183.066 1.00 0.00 51 ATOM 437 **ATOM** 438 CA ARG 51 0.770 - 22.2892.511 1.00 0.00 1.967 -23.132 2.962 1.00 0.00 ATOM CBARG 51 439 ATOM 440 CG ARG 51 3.305 -22.615 2.409 1.00 0.00 ATOM 441 CDARG 51 3.603 -21.187 2.882 1.00 0.004.962 -20.766 ATOM 442 NE ARG 51 2.521 1.00 0.00

359 360 ATOM 443 CZ ARG 2.338 1.00 0.00 51 5.368 -19.498 NH1 ARG 51 2.466 1.00 0.00 ATOM 4.523 -18.468 444 NH2 ARG 6.646 -19.270 2.021 1.00 0.00 ATOM 445 51 C ARG 51 0.659 -22.209 0.992 1.00 0.00 ATOM 446 447 0 ARG 0.869 - 21.1400.421 1.00 0.00 ATOM 51 448 N TRP 52 0.320 -23.328 0.336 1.00 0.00 ATOM TRP 0.188 - 23.339-1.115 1.00 ATOM 449 CA 52 0.00 CB TRP 52 -0.082 -24.750 -1.630 1.00 ATOM 450 0.00 CG TRP -0.184 -24.815 -3.1231.00 ATOM 451 52 0.00 452 CD1 TRP 52 -1.307 -25.097 -3.8151.00 ATOM 0.00 ATOM NE1 TRP 52 -1.054 -25.066 -5.168 1.00 0.00 453 1.00 ATOM CE2 TRP 52 0.267 -24.749 -5.4200.00 454 ATOM CZ2 TRP 52 1.007 -24.593 -6.601 1.00 0.00 455 CH2 TRP ATOM 456 52 2.367 -24.264 -6.5221.00 0.00 CZ3 TRP ATOM 457 52 2.970 -24.096 -5.266 1.00 0.00 CE3 TRP **ATOM** 458 52 2.223 -24.250 -4.084 1.00 0.00 CD2 TRP ATOM 459 52 0.851 -24.584 -4.128 1.00 0.00 **ATOM** 460 C TRP 52 -0.881 -22.358-1.6141.00 0.00 ATOM 461 0 TRP -0.706 -21.746 -2.664 52 1.00 0.00 ATOM 462 N ARG -1.983 -22.202 -0.8731.00 53 0.00ATOM 463 CA ARG 53 -3.077 -21.302 -1.2101.00 0.00 **ATOM** 464 CBARG 53 -4.240 -21.514 -0.2261.00 0.00 ATOM 465 CG ARG 53 -5.373 -20.489 -0.3721.00 0.00 ARG ATOM 466 CD53 -6.678 -20.936 0.313 1.00 0.00 NE ATOM 467 ARG 53 -6.504 - 21.2681.742 1.00 0.00 ATOM 468 CZARG 53 -7.447 -21.160 2.700 1.00 0.00 NH1 ARG -8.676 -20.707 ATOM 469 53 2.419 1.00 0.00 NH2 ARG ATOM -7.158 -21.506 470 53 3.959 1.00 0.00 471 C ARG -2.545 -19.869 -1.249ATOM 53 1.00 0.00 0 ARG ATOM 472 53 -2.664 - 19.200-2.2721.00 0.00 N THR ATOM 473 54 -1.941 -19.405 -0.1491.00 0.00 ATOM CATHR -1.366 -18.069 -0.058 474 1.00 0.00 54 ATOM CBTHR 475 54 -0.742 -17.8861.335 1.00 0.00 ATOM 476 CG2 THR -0.215 -16.462 1.541 1.00 0.00 54 **ATOM** 477 OG1 THR 54 -1.720 -18.154 2.321 1.00 0.00 ATOM 478 C THR -0.334 -17.857 -1.1721.00 0.00 54 ATOM 479 0 THR 54 -0.361 -16.841 -1.868 1.00 0.00 ATOM 480 N MET 55 0.574 - 18.827-1.3321.00 0.00 ATOM 481 CA MET 55 1.636 -18.807 -2.3261.00 0.00 ATOM 482 CB MET 55 2.453 -20.104 -2.2171.00 0.00 MET 3.353 -20.114 -0.972ATOM 483 CG 55 1.00 0.00 ATOM 484 SD MET 55 5.098 - 19.719-1.2531.00 0.00 CE MET -2.255 ATOM 485 4.947 -18.220 1.00 0.00 55 1.085 -18.620 C MET 55 -3.7390.00 ATOM 486 1.00 MET ATOM 487 0 55 1.371 - 17.610-4.3841.00 0.00 ATOM 488 N LYS 56 0.307 -19.591 -4.2241.00 0.00 ATOM 489 CA LYS 56 -0.266 -19.554-5.5601.00 0.00 ATOM 490 CBLYS 56 -0.971 - 20.881-5.894 1.00 0.00 CG LYS ATOM 491 56 -2.439 - 20.946-5.455 1.00 0.00 CD ATOM 492 LYS -2.989 -22.364 -5.659 1.00 0.00 56

	361				362
ATOM	493	CE	LYS	56	-4.515 -22.356 -5.816 1.00 0.00
ATOM	494	NZ	LYS	56	-5.043 -23.719 -6.011 1.00 0.00
ATOM	495	C	LYS	56	-1.159 -18.328 -5.779 1.00 0.00
ATOM	496	0	LYS	56	-1.209 -17.796 -6.884 1.00 0.00
ATOM	497	N	ĹYS	57	-1.870 -17.875 -4.740 1.00 0.00
ATOM	498	CA	LYS	57	-2.756 -16.727 -4.844 1.00 0.00
ATOM	499	CB	LYS	57	-3.623 -16.624 -3.579 1.00 0.00
ATOM	500	CG	LYS	57	-4.553 -15.403 -3.596 1.00 0.00
ATOM	501	CD	LYS	57	-5.438 -15.403 -2.343 1.00 0.00
ATOM	502	CE	LYS	57	-6.341 -14.165 -2.263 1.00 0.00
ATOM	503.	NZ	LYS	57	-5.575 -12.917 -2.073 1.00 0.00
ATOM	504	C	LYS	57	-1.990 -15.426 -5.094 1.00 0.00
ATOM	505	0	LYS	57	-2.322 -14.701 -6.029 1.00 0.00
ATOM	506	N	LEU	58	-1.006 -15.107 -4.244 1.00 0.00
ATOM	507	CA	LEU	58	-0.272 -13.848 -4.335 1.00 0.00
ATOM	508	СВ	LEU	58	0.069 -13.346 -2.919 1.00 0.00
ATOM	509	CG	LEU	58	-0.190 -11.838 -2.764 1.00 0.00
ATOM	510		LEU	58	0.091 -11.403 -1.323 1.00 0.00
ATOM	511		LEU	58	0.644 -10.965 -3.710 1.00 0.00
ATOM	512	C	LEU	58	0.983 -13.905 -5.208 1.00 0.00
ATOM	513	0	LEU	58	1.169 -13.055 -6.075 1.00 0.00
ATOM	514	N	LYS	59	1.867 -14.876 -4.964 1.00 0.00
ATOM	515	CA	LYS	59	3.126 -14.983 -5.693 1.00 0.00
ATOM	516	CB	LYS	59	4.186 -15.679 -4.830 1.00 0.00
ATOM	517	CG	LYS	59	4.330 -15.065 -3.427 1.00 0.00
ATOM	518	CD	LYS	59	4.579 -13.550 -3.467 1.00 0.00
ATOM	519	CE	LYS	59	4.997 -13.002 -2.097 1.00 0.00
ATOM	520	NZ	LYS	59	3.948 -13.159 -1.074 1.00 0.00
ATOM	521	C	LYS	59	2.940 -15.682 -7.035 1.00 0.00
ATOM	522	0	LYS	59	3.622 -15.346 -7.999 1.00 0.00
ATOM	523	N	LEU	60	2.018 -16.647 -7.087 1.00 0.00
ATOM	524	CA	LEU	60	1.693 -17.418 -8.276 1.00 0.00
ATOM	525	СВ	LEU	60	1.005 -16.539 -9.335 1.00 0.00
ATOM	526	CG	LEU	60	0.468 -17.321 -10.550 1.00 0.00
ATOM	527		LEU	60	-0.633 -18.317 -10.167 1.00 0.00
ATOM	528		LEU	60	-0.092 -16.328 -11.574 1.00 0.00
ATOM	529		LEU	60	2.909 -18.183 -8.791 1.00 0.00
ATOM	530	0	LEU	60	3.520 -17.829 -9.799 1.00 0.00
ATOM	531	N	ILE	61	3.245 -19.255 -8.073 1.00 0.00
ATOM	532	CA	ILE	61	4.363 -20.127 -8.399 1.00 0.00
ATOM	533	CB	ILE	61	4.715 -21.015 -7.203 1.00 0.00
ATOM	534		ILE	61	5.968 -21.853 -7.512 1.00 0.00
ATOM	535		ILE	61	4.966 -20.130 -5.973 1.00 0.00
ATOM	536		ILE	61	5.352 -20.997 -4.787 1.00 0.00
ATOM	537	C	ILE	61	4.039 -20.948 -9.649 1.00 0.00
ATOM	538	0	ILE	61	3.529 -22.068 -9.569 1.00 0.00
ATOM	539	N	SER	62	4.366 -20.366 -10.801 1.00 0.00
ATOM	540	CA	SER	62	4.175 -20.954 -12.118 1.00 0.00
ATOM	541	CB	SER	62	4.062 -19.824 -13.152 1.00 0.00
ATOM	542	0G	SER	62	3.682 -20.344 -14.410 1.00 0.00

```
(183)
       363
ATOM
        543 C
                 SER
                        62
                                  5.327 -21.930 -12.407 1.00 0.00
ATOM
        544
            0
                 SER
                        62
                                  5.778 -22.637 -11.506
                                                         1.00
ATOM
        545 N
                 SER
                        63
                                  5.807 -21.974 -13.653
                                                         1.00
ATOM
        546 CA
                 SER
                        63
                                  6.902 -22.833 -14.080
                                                         1.00
ATOM
        547
            CB
                 SER
                        63
                                  6.355 -24.198 -14.524
                                                         1.00
                 SER
ATOM
        548
            OG.
                        63
                                  7.407 -25.095 -14.815
                                                         1.00
            С
                 SER
                        63
ATOM
        549
                                  7.678 -22.112 -15.181
                                                          1.00
        550 0
                 SER
ATOM
                         63
                                  8.831 -21.744 -14.973
                                                         1.00
        551 N
                 ASP
                         64
                                  7.028 -21.908 -16.334
ATOM
                                                         1.00
        552 CA
                 ASP
                                  7.564 -21.220 -17.502
ATOM
                         64
                                                        1.00
ATOM
             CB
                 ASP
                                  7.461 -19.699 -17.296
        553
                         64
                                                          1.00
             CG
                 ASP
ATOM
        554
                         64
                                  6.011 -19.263 -17.123
                                                         1.00
ATOM
        555
             OD1 ASP
                                  5.377 -18.970 -18.158
                         64
                                                         1.00
             OD2 ASP
                                  5.553 -19.251 -15.959
ATOM
        556
                         64
                                                          1.00
ATOM
             С
                 ASP
                                  8.972 -21.711 -17.855
                                                          1.00
        557
                         64
             0
                 ASP
ATOM
        558
                         64
                                  9.122 -22.822 -18.360
                                                          1.00
             N
                 SER
                                  9.998 -20.892 -17.598
ATOM
        559
                         65
                                                          1.00
        560 CA
                 SER
                                 11.403 -21.178 -17.850
ATOM
                         65
                                                          1.00
ATOM
             CB
                 SER
                                 11.727 -21.023 -19.344
                                                          1.00
        561
                         65
                 SER
ATOM
        562 OG
                         65
                                 11.205 -22.103 -20.092
                                                         1.00
ATOM
        563 C
                 SER
                         65
                                 12.239 -20.206 -17.020
                                                         1.00
        564
             0
                 SER
                                 11.733 -19.168 -16.592
ATOM
                         65
                                                         1.00 0.00
ATOM
        565
             N
                 GLU
                         66
                                 13.512 -20.550 -16.804
                                                         1.00
             CA
                 GLU
ATOM
        566
                         66
                                 14.478 -19.764 -16.053
                                                         1.00
ATOM
        567
             CB
                 GLU
                         66
                                 14.860 -20.493 -14.753
                                                         1.00
             CG
                 GLU
ATOM
        568
                         66
                                 15.197 -21.984 -14.930
                                                          1.00 0.00
                                 15.542 -22.649 -13.599
ATOM
        569
             CD
                 GLU
                         66
ATOM
        570
             OE1 GLU
                         66
                                 16.603 -23.307 -13.545
ATOM
        571
             OE2 GLU
                         66
                                 14.726 -22.506 -12.662
             C
ATOM
        572
                  GLU
                         66
                                 15.678 -19.477 -16.957
ATOM
        573
             0
                  GLU
                         66
                                 16.155 -20.377 -17.651
ATOM
             N
                  ASP
        574
                         67
                                 16.137 -18.218 -16.950
                 ASP
ATOM
        575
             CA
                         67
                                 17.255 -17.717 -17.743
                 ASP
        576
             CB
                                 18.588 -18.242 -17.185
ATOM
                         67
             CG
                 ASP
ATOM
        577
                         67
                                 18.830 -17.771 -15.753
                                                          1.00
             OD1 ASP
                         67
ATOM
        578
                                 18.392 -18.491 -14.829
ATOM
        579
             OD2 ASP
                                 19.448 -16.693 -15.606
                                                         1.00
                         67
ATOM
        580
             C
                  ASP
                                 17.046 -18.011 -19.235
                                                          1.00
                         67
             OT1 ASP
ATOM
        581
                         67
                                 15.897 -17.795 -19.681
                                                          1.00
ATOM
        582
             OT2 ASP
                         67
                                 18.071 -18.089 -19.947
ATOM
             05' GUA
                                 -6.527 -39.842
        583
                         68
                                                  11.135
ATOM
        584
             C5' GUA
                         68
                                 -6.220 -40.537
                                                   9.946
             C4'
                 GUA
ATOM
        585
                         68
                                 -6.660 -39.726
                                                   8.725
                                                          1.00
ATOM
         586
             04'
                 GUA
                         68
                                 -8.028 -39.376
                                                   8.805
                                                                0.00
ATOM
         587
             C1'
                  GUA
                                 -8.259 -38.385
                                                   7.826
                                                          1.00
                                                                0.00
                         68
             N9
                  GUA
                                 -9.490 -37.617
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         588
                         68
                                                   8.105
              С8
                  GUA
                                 -9.860 -37.022
ATOM
         589
                         68
                                                   9.280
                                                          1.00
                                                                0.00
```

ATOM

ATOM

ATOM

590 N7 GUA

591 C5 GUA

592 C6 GUA

68

68

68

-11.017 -36.424

-11.437 -36.610

-12.625 -36.173

9.238

7.925

1.00

1.00

7.265 1.00 0.00

0.00

0.00

```
365
                                                                    366
ATOM
        593
            06
                 GUA
                                -13.598 -35.601
                                                   7.753 1.00 0.00
                         68
ATOM
        594
             N1
                  GUA
                         68
                                -12.612 -36.461
                                                    5.906
                                                          1.00 0.00
ATOM
        595
             C2
                  GUA
                         68
                                -11.601 -37.141
                                                    5.258
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        596
             N2
                  GUA
                         68
                                -11.718 -37.332
                                                    3.944
                                                           1.00
                                                                 0.00
             N3
                  GUA
                                 -10.508 -37.599
                                                    5.885
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        597
                         68
ATOM
        598
             C4
                  GUA
                         68
                                 -10.483 -37.298
                                                    7.211
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C3'
                  GUA
                                  -5.927 -38.385
                                                    8.573
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        599
                         68
ATOM
        600
             C2'
                  GUA
                         68
                                  -7.034 -37.505
                                                    7.979
                                                           1.00
                                                                 0.00
        601
             03'
                  GUA
                                  -4.798 -38.571
                                                    7.729
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         68
        602
             P
                  THY
                         69
                                  -3.895 -37.352
                                                    7.154
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
        603
             OP1 THY
                          69
                                  -3.792 -36.306
                                                    8.195
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        604
             OP2 THY
                         69
                                  -2.666 -37.925
                                                    6.560
                                                           1.00
                                                                 0.00
             05'
                  THY
                                  -4.792 -36.769
                                                    5.948
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        605
                          69
              C5'
ATOM
         606
                  THY
                          69
                                  -5.434 -37.629
                                                    5.020
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C4'
                  THY
                                  -6.523 - 36.872
                                                    4.256
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         607
                          69
ATOM
         608
              04'
                  THY
                          69
                                  -7.592 - 36.383
                                                    5.029
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  THY
                                  -8.156 -35.265
                                                    4.384
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         609
             C1'
                          69
              N1
                  THY
                                  -8.999 -34.535
                                                    5.367
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         610
                          69
                                                                 0.00
                  THY
                                  -8.575 -34.414
                                                    6.670
                                                           1.00
ATOM
         611
              60
                          69
              C5
                  THY
                                  -9.357 -33.835
                                                    7.613
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         612
                          69
                  THY
                                  -8.769 -33.723
                                                    9.009
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         613
              С7
                          69
              C4
                  THY
                          69
                                 -10.681 -33.339
                                                    7.298
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         614
                  THY
                                 -11.456 -32.813
                                                    8.089
                                                           1.00
                                                                 0.00
         615
              04
                          69
ATOM
ATOM
         616
              N3
                  THY
                          69
                                 -11.041 -33.506
                                                    5.971
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C2
                  THY
                                 -10.258 -34.074
                                                    4.978
ATOM
         617
                          69
              02
                  THY
                                 -10.679 -34.152
                                                    3.827
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         618
                          69
              C3' THY
                                  -5.991 -35.659
                                                    3.480
                                                           1.00
                                                                  0.00
         619
                          69
ATOM
ATOM
         620
              C2'
                  THY
                          69
                                  -6.886 -34.522
                                                    3.986
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         621
              03'
                  THY
                          69
                                  -6.092 -35.902
                                                    2.088
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                  -5.332 -34.978
                                                           1.00
ATOM
         622
              P
                  THY
                          70
                                                    1.002
                                                                  0.00
              OP1 THY
                                  -4.102 -34.446
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         623
                          70
                                                    1.628
              OP2 THY
                                  -5.224 -35.739
                                                   -0.259
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         624
                          70
              05' THY
                                  -6.358 -33.756
                                                    0.781
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         625
                          70
ATOM
         626
              C5'
                  THY
                          70
                                  -7.520 -33.917
                                                   -0.012
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              C4'
                  THY
                          70
                                  -8.517 -32.778
                                                    0.225
                                                            1.00
                                                                  0.00
         627
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         628
              04'
                  THY
                          70
                                  -8.935 - 32.733
                                                    1.572
ATOM
         629
              C1'
                  THY
                          70
                                  -9.605 -31.504
                                                    1.747
                                                            1.00
                                                                  0.00
              N1
                  THY
                                  -9.757 -31.162
                                                    3.182
                                                                  0.00
 ATOM
         630
                          70
                                                           1.00
              63
                  THY
                                  -8.686 -31.292
                                                    4.026
                                                            1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         631
                          70
              C5
                  THY
                          70
                                  -8.786 -30.961
                                                    5.335
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         632
 ATOM
              C7
                  THY
                          70
                                  -7.526 -31.159
                                                    6.148
                                                           1.00
                                                                  0.00
         633
                  THY
                                  -10.021 -30.459
                                                    5.903
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
              C4
                          70
         634
 ATOM
         635
              04
                  THY
                          70
                                  -10.189 -30.108
                                                    7.067
                                                            1.00
                                                                  0.00
              N3
                  THY
                          70
                                  -11.069 -30.409
                                                    5.000 1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         636
 ATOM
         637
              C2
                  THY
                          70
                                  -10.986 -30.689
                                                    3.645
                                                           1.00
                                                                  0.00
              02
                  THY
                                                                  0.00
 ATOM
         638
                          70
                                  -11.952 -30.492
                                                    2.912 1.00
                                                            1.00
 ATOM
         639
              C3'
                  THY
                          70
                                  -7.959 -31.372
                                                    -0.026
                                                                  0.00
 ATOM
         640
              C2'
                  THY
                          70
                                   -8.690 -30.519
                                                     1.024
                                                            1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         641
              03'
                  THY
                          70
                                   -8.207 -30.986
                                                   -1.366
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         642
              P
                   ADE
                          71
                                   -7.817 -29.528
                                                   -1.931 1.00 0.00
```

```
367
                                                                     368
                                                          1.00 0.00
ATOM
        643
             OP1 ADE
                         71
                                  -6.614 -29.037
                                                  -1.217
             OP2 ADE
                         71
                                  -7.835 -29.565
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        644
                                                   -3.408
             05' ADE
                                  -9.042 -28.626
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        645
                         71
                                                   -1.435
             C5'
                  ADE
                                 -10.385 -28.854
                                                   -1.824
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        646
                         71
             C4'
                  ADE
                                 -11.285 -27.844
                                                   -1.094
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        647
                         71
             04'
                  ADE
ATOM
        648
                         71
                                 -11.488 - 28.204
                                                    0.278
                                                           1.00
                                                                  0.00
             C1'
                  ADE
                                 -11.356 -27.040
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        649
                         71
                                                    1.073
ATOM
        650
             N9
                  ADE
                         71
                                 -11.052 -27.267
                                                    2.508
                                                            1.00
                                                                  0.00
             68
                  ADE
                         71
ATOM
        651
                                  -9.868 - 27.699
                                                    3.047
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        652
              N7
                  ADE
                         71
                                  -9.796 -27.661
                                                    4.342
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        653
              C5
                  ADE
                         71
                                 -11.031 -27.144
                                                    4.701
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        654
              60
                  ADE
                         71
                                 -11.580 -26.815
                                                    5.950
                                                            1.00
                                                                  0.00
              N6
                  ADE
ATOM
        655
                         71
                                 -10.904 -27.026
                                                    7.077
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        656
              N1
                  ADE
                         71
                                 -12.796 -26.241
                                                    5.998
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C2
                  ADE
                                 -13.432 - 26.009
                                                                  0.00
ATOM
        657
                         71
                                                    4.849
                                                            1.00
ATOM
        658
              N3
                  ADE
                         71
                                 -13.029 - 26.284
                                                    3.609
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C4
                  ADE
ATOM
        659
                         71
                                 -11.798 -26.866
                                                    3.598
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C3'
ATOM
        660
                  ADE
                         71
                                 -10.596 -26.470
                                                   -1.064
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C2'
                  ADE
                                 -10.129 -26.461
                                                                  0.00
ATOM
        661
                         71
                                                    0.390
                                                            1.00
              03'
                  ADE
ATOM
        662
                          71
                                 -11.497 -25.427
                                                   -1.341
                                                            1.00
                                                                  0.00
              P
                  GUA
                                 -10.980 -23.932
ATOM
        663
                                                   -1.638
                                                            1.00
                                                                  0.00
                         72
              OP1 GUA
ATOM
        664
                          72
                                 -11.150 -23.646
                                                   -3.077
                                                            1.00
                                                                  0.00
              OP2 GUA
                                  -9.649 -23.760
ATOM
        665
                          72
                                                   -1.003
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        666
              05'
                  GUA
                          72
                                 -12.054 -23.094
                                                   -0.801
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C5'
                  GUA
ATOM
                          72
                                 -13.438 -23.202
                                                   -1.075
                                                            1.00
                                                                  0.00
        667
                                 -14.220 -22.554
ATOM
         668
              C4'
                  GUA
                          72
                                                    0.065
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
              04'
                  GUA
                          72
                                 -13.852 -23.179
         669
                                                    1.285
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        670
              C1'
                  GUA
                          72
                                 -13.412 -22.227
                                                     2.232
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        671
              N9
                  GUA
                          72
                                 -12.307 -22.799
                                                    3.044
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        672
              C8
                  GUA
                          72
                                 -11.124 -23.346
                                                     2.604
                                                            1.00
                                                                   0.00
ATOM
         673
              N7
                  GUA
                          72
                                 -10.320 -23.734
                                                    <sup>1</sup>3.552 1.00
                                                                  0.00
              C5
                                 -11.030 -23.461
ATOM
         674
                  GUA
                          72
                                                     4.715
                                                            1.00
                                                                   0.00
ATOM
         675
              C6
                  GUA'
                                 -10.682 -23.702
                          72
                                                    6.077
                                                            1.00
                                                                   0.00
ATOM
         676
              06
                  GUA
                          72
                                  -9.627 - 24.148
                                                     6.519
                                                            1.00
                                                                   0.00
                  GUA
                                 -11.708 -23.377
ATOM
         677
              N1
                          72
                                                     6.957
                                                            1.00
                                                                   0.00
              C2
                  GUA
                                 -12.925 -22.850
ATOM
         678
                          72
                                                    6.575
                                                            1.00
                                                                   0.00
              N2
ATOM
         679
                  GUA
                          72
                                 -13.802 -22.569
                                                     7.540
                                                            1.00
                                                                   0.00
              N3
                  GUA
                                 -13.240 -22.581
ATOM
         680
                          72
                                                     5.298
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C4
                  GUA
                          72
                                 -12.260 -22.918
ATOM
         681
                                                     4.415
                                                            1.00
                                                                   0.00
              C3'
                  GUA
ATOM
         682
                          72
                                 -13.883 -21.065
                                                     0.194
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         683
              C2'
                  GUA
                          72
                                 -12.924 -21.055
                                                     1.383
                                                            1.00
                                                                   0.00
ATOM
              03'
                  GUA
                                 -15.080 -20.342
         684
                          72
                                                     0.407
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         685
              P
                  GUA
                          73
                                 -15.113 -18.729
                                                     0.473
                                                            1.00
                                                                   0.00
              OP1 GUA
ATOM
         686
                          73
                                 -13.885 -18.197
                                                    -0.160
                                                            1.00
                                                                   0.00
ATOM
         687
              OP2 GUA
                          73
                                 -16.442 -18.272
                                                     0.011
                                                            1.00
                                                                   0.00
ATOM
              05'
                  GUA
                                 -15.015 -18.485
                                                                   0.00
         688
                          73
                                                     2.055
                                                            1.00
ATOM
         689
              C5'
                  GUA
                          73
                                 -16.059 -18.905
                                                     2.911
                                                            1.00
                                                                   0.00
              C4'
                  GUA
ATOM
         690
                          73
                                 -15.642 -18.722
                                                     4.367
                                                            1.00
                                                                   0.00
              04'
                  GUA
         691
                          73
                                 -14.469 -19.473
                                                                   0.00
ATOM
                                                     4.631
                                                            1.00
ATOM
         692
              C1' GUA
                          73
                                 -13.659 -18.739
                                                     5.520 1.00
                                                                   0.00
```

```
369
                                                                   370
ATOM
        693
            N9
                 GUA
                         73
                                -12.267 -19.236
                                                   5.460
                                                          1.00 0.00
             C8
                  GUA
                         73
                                -11.431 -19.299
                                                   4.375
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        694
                  GUA
             N7
                         73
                                -10.285 -19.875
                                                    4.607
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        695
                  GUA
                                 -10.354 -20.192
                                                   5.959
                                                          1.00
        696
             C5
                         73
                                                                 0.00
ATOM
             6
                  GUA
                                 -9.391 -20.819
                                                   6.802 1.00
                                                                 0.00
        697
                         73
ATOM
             06
                  GUA
                                 -8.271 -21.212
                                                   6.488
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        698
                         73
                  GUA
                                 -9.847 -20.987
                                                          1.00
                                                                 0.00
        699
             N1
                         73
                                                    8.106
ATOM
                  GUA
                         73
                                 -11.091 -20.590
                                                   8.551 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        700
             C2
        701 N2
                  GUA
                         73
                                 -11.390 -20.797
                                                    9.833
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                  GUA
        702 N3
                         73
                                 -11.989 -19.980
                                                    7.769
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                  GUA
             C4
                         73
                                 -11.563 -19.811
                                                    6.488
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        703
             C3'
                  GUA
                         73
                                 -15.315 -17.262
                                                    4.725
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        704
             C2'
                  GUA
        705
                         73
                                 -13.804 -17.330
                                                    4.954
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             03'
                  GUA
                         73
                                                    5.885
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        706
                                 -16.056 -16.934
        707 P
                  GUA
                         74
                                 -16.000 -15.487
                                                    6.593
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
        708
             OP1 GUA
                         74
                                 -15.072 -14.610
                                                    5.846
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP2 GUA
                                                           1.00
                                                                 0.00
        709
                         74
                                 -17.386 -15.042
                                                    6.858
ATOM
                                                           1.00
             05'
                  GUA
                                 -15.314 -15.876
                                                    7.994
                                                                 0.00
ATOM
        710
                         74
ATOM
        711
             C5'
                  GUA
                         74
                                 -15.984 -16.721
                                                    8.910
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         712
             C4'
                  GUA
                         74
                                 -15.099 -17.015
                                                   10.121
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         713
             04'
                  GUA
                                 -13.886 -17.612
                                                    9.689
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         74
ATOM
         714
              C1'
                  GUA
                         74
                                 -12.789 -16.983
                                                   10.316
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N9
                  GUA
                                 -11.601 -17.078
                                                          1.00
ATOM
         715
                         74
                                                    9.436
                                                                0.00
              68
                  GUA
                                 -11.482 -16.686
                                                    8.126
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         716
                         74
              N7
                  GUA
                                 -10.331 -16.966
                                                    7.583
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         717
                         74
              C5
                  GUA
                         74
                                  -9.628 -17.593
                                                    8.605
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         718
         719
              60
                  GUA
                         74
                                  -8.320 -18.165
                                                    8.604
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              06
                  GUA
                         74
                                  -7.532 -18.246
                                                    7.665
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         720
ATOM
              N1
                  GUA
                                  -7.970 -18.690
                                                    9.843
                                                           1.00
                                                                  0.00
         721
                         74
ATOM
         722
              C2
                  GUA
                          74
                                  -8.796 -18.705
                                                   10.947
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         723
              N2
                  GUA
                          74
                                  -8.305 -19.188
                                                   12.089
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         724
              N3
                  GUA
                          74
                                 -10.034 -18.193
                                                   10.942
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  GUA
                                 -10.392 -17.655
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         725
              C4
                          74
                                                    9.747
              C3'
                  GUA
                                 -14.719 -15.743
                                                   10.893
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         726
                          74
         727
              C2'
                  GUA
                                 -13.267 -15.542
                                                   10.465
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
                          74
              03'
                  GUA
                                 -14.882 -15.996
                                                   12.277
                                                           1.00
                                                                  0.00
         728
                          74
ATOM
         729
              P
                  THY
                                 -14.583 -14.885
                                                   13.409
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
                          75
              OP1 THY
                                                   14.542
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         730
                          75
                                 -15.506 -15.114
ATOM
         731
              OP2 THY
                          75
                                 -14.512 -13.552
                                                   12.771
                                                           1.00
                                                                  0.00
              05' THY
ATOM
         732
                          75
                                 -13.102 -15.305
                                                   13.870
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C5' THY
                                 -12.872 -16.545
                                                   14.513
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         733
                          75
 ATOM
              C4'
                  THY
                          75
                                 -11.378 -16.725
                                                   14.779
                                                           1.00
                                                                  0.00
         734
 ATOM
         735
              04'
                  THY
                          75
                                 -10.658 -16.681
                                                   13.562
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  THY
 ATOM
         736
              C1'
                          75
                                  -9.389 -16.118
                                                   13.807
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                                                  0.00
 ATOM
         737
              N1
                  THY
                          75
                                  -8.772 -15.663
                                                   12.530
                                                           1.00
              C6
                  THY
                                  -9.504 -14.924
                                                   11.627
                                                            1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         738
                          75
                  THY
                                                                  0.00
              C5
                          75
                                  -9.003 -14.609
                                                   10.404
                                                           1.00
 ATOM
         739
              C7
                  THY
                                  -9.897 -13.780
                                                                  0.00
         740
                          75
                                                    9.503
                                                           1.00
 ATOM
              C4
                  THY
                          75
                                  -7.685 -15.045
                                                    9.990
                                                                  0.00
 ATOM
         741
                                                           1.00
 ATOM
         742 .04
                  THY
                          75
                                  -7.167 -14.857
                                                    8.892
                                                           1.00
                                                                  0.00
```

```
371
                                                                   372
ATOM
        743
             N3
                 THY
                         75
                                 -7.002 -15.749
                                                 10.964
                                                          1.00 0.00
                         75
             C2
                 THY
                                 -7.478 -16.082
                                                 12.220
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        744
                                                  12.988
ATOM
        745
             02
                 THY
                         75
                                 -6.765 -16.722
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 THY
        746
            C3'
                         75
                                -10.788 -15.615
                                                  15.662
                                                          1.00
ATOM
                                                                 0.00
ATOM
        747
             C2'
                 THY
                         75
                                 -9.762 -14.961
                                                  14.730
                                                          1.00
                                                                 0.00
             03'
        748
                 THY
                         75
                                -10.218 -16.220
                                                  16.809
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
        749
             P
                  THY
                         76
                                 -9.511 -15.370
                                                  17.983
                                                          1.00
                                                                 0.00
        750 OP1 THY
                                 -9.959 -13.962
                                                  17.895
ATOM
                         76
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        751
             OP2 THY
                         76
                                  -9.658 -16.116
                                                  19.251
                                                          1.00
                                                                 0.00
             05'
ATOM
        752
                 THY
                         76
                                  -7.969 -15.439
                                                  17.531
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C5' THY
                                                  17.517
ATOM
        753
                         76
                                  -7.279 -16.672
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C4'
                 THY
                                                  16.980
ATOM
        754
                         76
                                  -5.860 -16.480
                                                          1.00
                                                                 0.00
             04'
                  THY
                                                          1.00
ATOM
        755
                         76
                                  -5.898 -16.006
                                                  15.645
                                                                 0.00
                                                          1.00
ATOM
        756
             C1'
                 THY
                         76
                                 -4.836 -15.096
                                                  15.468
                                                                 0.00
ATOM
        757
             N1
                  THY
                         76
                                  -5.024 -14.301
                                                  14.220
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        758
             60
                  THY
                         76
                                  -6.160 -13.547
                                                  14.030
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                          1.00
ATOM
        759
             C5
                  THY
                         76
                                  -6.403 -12.926
                                                  12.847
                                                                 0.00
ATOM
        760
             C7
                  THY
                         76
                                  -7.683 -12.112 12.774
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        761
             C4
                  THY
                         76
                                  -5.489 -13.035
                                                  11.728
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                          1.00
ATOM
        762
             04
                  THY
                         76
                                  -5.651 -12.550
                                                  10.610
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
        763
             N3
                         76
                                  -4.355 -13.774 12.011
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
        764
             C2
                         76
                                  -4.070 -14.416
                                                 13.206
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                  -3.019 -15.047
ATOM
         765
             02
                  THY
                         76
                                                  13.323
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             C3'
                  THY
                         76
                                  -5.055 -15.437
                                                  17.772
         766
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                           1.00
ATOM
         767
             C2'
                  THY
                         76
                                  -4.951 -14.292
                                                  16.761
                                                                 0.00
ATOM
         768
              03'
                  THY
                         76
                                  -3.790 -15.997
                                                  18.079
                                                           1.00
                                                                 0.00
              P
                  ADE
ATOM
         769
                         77
                                  -2.756 -15.307
                                                  19.106
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP1 ADE
ATOM
         770
                         77
                                  -3.188 -13.918
                                                  19.373
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP2 ADE
                         77
                                                  20.233
ATOM
         771
                                  -2.522 -16.236
                                                           1.00
                                                                 0.00
              05'
                 ADE
ATOM
         772
                         77
                                  -1.420 -15.241
                                                  18.216
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C5'
                 ADE
                                  -0.716 -16.411
ATOM
         773
                         77
                                                  17.856
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         774
              C4'
                  ADE
                         77
                                   0.514 - 16.064
                                                  17.013
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         775
              04'
                  ADE
                                   0.111 -15.402
                         77
                                                  15.826
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         776
             C1'
                  ADE
                         77
                                   0.673 - 14.106
                                                  15.748
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         777
              N9
                  ADE
                         77
                                  -0.324 -13.202
                                                  15.123
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         778
              68
                  ADE
                         77
                                  -1.565 -12.853
                                                  15.598
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         779
              N7
                  ADE
                                  -2.319 -12.229
                                                  14.735
                         77
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         780
              C5
                  ADE
                         77
                                  -1.516 -12.140
                                                  13.606
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         781
              С6
                  ADE
                         77
                                  -1.733 -11.614
                                                  12.316
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         782
              N6
                  ADE
                         77
                                  -2.879 -11.031
                                                  11.967
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         783
              N1
                  ADE
                         77
                                  -0.751 -11.717
                                                  11.399
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         784
              C2
                  ADE
                         77
                                   0.384 - 12.313
                                                  11.748
                                                           1.00
                                                                 0.00
              N3
                  ADE
                                                  12.913
ATOM
         785
                         77
                                   0.700 - 12.877
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C4
                  ADE
                         77
                                  -0.295 -12.722
                                                  13.831
                                                                 0.00
ATOM
         786
                                                           1.00
              C3'
                  ADE
                                   1.500 -15.121
ATOM
         787
                         77
                                                  17.714
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C2'
ATOM
         788
                  ADE
                         77
                                   1.030 -13.757
                                                  17.192
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         789
              03'
                  ADE
                         77
                                   2.805 -15.484
                                                  17.287
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         790
              P
                  GUA
                          78
                                   4.144 -14.995
                                                   18.043
                                                           1.00
                                                                 0.00
         791
              OP1 GUA
                          78
                                   3.933 -15.054
                                                   19.507
                                                                 0.00
ATOM
                                                           1.00
ATOM
              OP2 GUA
                                   5.308 -15.697
                                                  17.445
                                                                 0.00
         792
                          78
                                                          1.00
```

373 374 ATOM 793 05' GUA 78 4.203 -13.447 17.624 1.00 0.00 ATOM 794 C5' **GUA** 78 4.599 -13.036 16.332 1.00 0.00 ATOM 795 C4' GUA 78 4.339 -11.546 16.110 1.00 0.00 **ATOM** 796 04' GUA 78 3.019 -11.326 15.674 1.00 0.00 C1' GUA 2.806 -9.94215.790 1.00 0.00 ATOM 797 78 **ATOM** 798 N9 **GUA** 78 1.382 -9.638 15.553 1.00 0.00 **C8 GUA** 78 0.282 - 10.02516.275 1.00 0.00 ATOM 799 ATOM 800 N7 GUA 78 -0.854-9.70915.719 1.00 0.00 **C5 GUA** -0.488-9.08014.535 1.00 0.00 ATOM 801 78 802 60 GUA 78 -1.292-8.54113.486 1.00 0.00 ATOM 803 06 GUA 78 -2.518-8.493 13.412 1.00 0.00 ATOM ATOM 804 N1 **GUA** 78 -0.528-8.00412.454 1.00 0.00 ATOM 805 C2 GUA 78 0.852 -7.95612.451 1.00 0.00 ATOM 806 N2 GUA 78 1.460 -7.33411.441 1.00 0.00 GUA 78 -8.46613.431 1.00 0.00 ATOM 807 N3 1.607 ATOM 808 C4GUA 78 0.880 -9.01814.436 1.00 0.00 C3' GUA 17.344 0.00 809 78 4.478 -10.636 1.00 ATOM C2' GUA 3.273 -9.690 17.220 1.00 0.00 ATOM 810 78 GUA 5.747 -10.004 0.00 03' 78 17.333 1.00 ATOM 811 18.473 ATOM 812 P **GUA** 79 6.189 -8.9521.00 0.00 OP1 GUA -9.23019.686 1.00 0.00 ATOM 813 79 5.381 OP2 GUA 79 7.665 -8.957 18.573 1.00 0.00 ATOM 814 05' GUA -7.558 17.831 1.00 0.00 79 5.715 ATOM 815 **ATOM** 816 C5' GUA 79 6.302 -7.084 16.633 1.00 0.00 0.00 C4' GUA 5.397 -6.05215.961 1.00 ATOM 79 817 04' GUA 4.078 -6.54315.802 1.00 0.00 ATOM 818 79 GUA 0.00 819 C1' 79 3.229 -5.42615.684 1.00 ATOM ATOM 820 N9 **GUA** 1.812 -5.80415.883 1.00 0.00 79 **ATOM** 821 C8 GUA 79 1.258 -6.49616.929 1.00 0.00 16.854 ATOM 822 N7 GUA 79 -0.035-6.6321.00 0.00 -0.368-6.00715.658 ATOM 823 C5 GUA 79 1.00 0.00 -1.636 -5.861 15.021 1.00 0.00 ATOM 824 С6 GUA 79 06 GUA -2.736-6.23015.424 1.00 0.00 ATOM 825 79 ATOM 826 N1 GUA 79 -1.543-5.23613.781 1.00 0.00 -4.784 13.225 ATOM 827 C2GUA 79 -0.3631.00 0.00 GUA 79 -4.22212.016 1.00 0.00 ATOM 828 N2 -0.424GUA -4.894ATOM 829 N3 79 0.825 13.833 1.00 0.00GUA -5.51915.041 0.00 C4 79 0.760 1.00 ATOM 830 C3' GUA 5.261 -4.73516.740 1.00 0.00 ATOM 831 79 -4.554ATOM 832 C2' GUA 79 3.741 16.828 1.00 0.00 **ATOM** 833 03' GUA 79 5.924 -3.72815.996 1.00 0.00 P GUA 5.995 -2.19016.473 1.00 0.00 ATOM 834 80 ATOM 835 OP1 GUA 80 5.747 -2.128 17.931 1.00 0.00 -1.583ATOM 836 OP2 GUA 80 7.219 15.903 1.00 0.00 ATOM 837 05' GUA 80 4.723 -1.56515.712 1.00 0.00 ATOM C5' GUA 4.694 -1.49114.299 1.00 0.00 838 80 ATOM 839 C4' GUA 80 3.330 -0.98513.826 1.00 0.00 ATOM 840 04' GUA 80 2.315 -1.86614.271 1.00 0.00 GUA 0.00 ATOM 841 C1' 80 1.156 -1.10814.520 1.00 ATOM 842 N9 GUA 0.196-1.85615.360 1.00 0.00 80

	055				(103)				111111111111111111111111111111111111111
	375								376
ATOM	843	C8	GUA	80	0.399	-2.434	16.587	1.00	0.00
ATOM	844	N7	GUA	80	-0.664	-2.988	17.098	1.00	0.00
ATOM	845	C5	GUA	80	-1.646	-2.776	16.137	1.00	0.00
ATOM	846	C6 .	GUA	80	-3.020	-3.168	16.117	1.00	0.00
ATOM	847	06	GUA	80	-3.654	-3.771	16.981	1.00	0.00
ATOM	848	N1	GUA	80	-3.653	-2.806	14.935	1.00	0.00
ATOM	849	C2	GUA	80	-3.053	-2.131	13.893	1.00	0.00
ATOM	850	N2	GUA	80	-3.804	-1.851	12.826	1.00	0.00
ATOM	851	N3	GUA	80	-1.771	-1.741	13.916	1.00	0.00
ATOM	852	C4	GUA	80	-1.123	-2.099	15.060	1.00	0.00
ATOM	853	C3'	GUA	80	2.967	0.396	14.398	1.00	0.00
ATOM	854	C2'	GUA	80	1.736	0.100	15.250	1.00	0.00
ATOM	855	03'	GUA	80	2.633	1.299	13.362	1.00	0.00
ATOM	856	05'	CYT	81	-13.164	-3.225	13.508	1.00	0.00
ATOM	857	C5 <b>'</b>	CYT	81	-12.818	-1.987	12.925	1.00	0.00
ATOM	858	C4'	CYT	81	-11.337	-1.972	12.537	1.00	0.00
ATOM	859	04'	CYT	81	-10.517	-2.295	13.639	1.00	0.00
ATOM	860	C1'	CYT	81	-9.255	-2.643	13.114	1.00	0.00
ATOM	861	N1	CYT	81	-8.430	-3.372	14.107	1.00	0.00
ATOM	862	C6	CYT	81	-8.986	-4.374	14.863	1.00	0.00
ATOM	863	C5	CYT	81	-8.240	-5.115	15.713	1.00	0.00
ATOM	864	C4	CYT	81	-6.845	-4.789	15.807	1.00	0.00
ATOM	865	N4	CYT	81	-6.044	-5.439	16.654	1.00	0.00
ATOM	866	N3	CYT	81	-6.308	-3.829	15.045	1.00	0.00
ATOM	867	C2	CYT	81	-7.064	-3.112	14.170	1.00	0.00
ATOM	868	02	CYT	81	-6.531	-2.266	13.455	1.00	0.00
ATOM	869	C3'	CYT	81	-10.962	-3.009	11.468	1.00	0.00
ATOM	870	C2'	CYT	81	-9.628	-3.566	11.963	1.00	0.00
ATOM	871	03'	CYT	81	-10.868	-2.370	10.207	1.00	0.00
ATOM	872	P	CYT	82	-10.510	-3.174	8.853	1.00	0.00
ATOM	873		CYT	82	-11.131	-2.456	7.719	1.00	0.00
ATOM	874		CYT	82	-10.813	-4.604	9.074	1.00	0.00
ATOM	875		CYT	82 82	-8.904	-3.019	8.739	1.00	0.00
ATOM	876	C5'		82	-8.296	-1.779	8.425	1.00	0.00
ATOM	877	C4'	CYT	82	-6.790	-1.946	8.175	1.00	0.00
ATOM	878	04'	CYT	82	-6.117	-2.351	9.351	1.00	0.00
ATOM	879	C1'	CYT	82	-5.174	-3.367	9.070	1.00	0.00
ATOM	880	N1	CYT	82	-5.104	-4.228	10.277	1.00	0.00
ATOM	881	C6	CYT	82	-6.268	-4.739	10.784	1.00	0.00
ATOM	882	C5	CYT	82	-6.292	-5.492	11.900	1.00	0.00
ATOM	883	C4	CYT	82	-5.034	-5.727	12.550	1.00	0.00
ATOM	884	N4	CYT	82	-4.979	-6.516	13.624	1.00	0.00
ATOM	885	N3	CYT	82	-3.895	-5.199	12.074	1.00	0.00
ATOM	886	C2	CYT	82	-3.892	-4.444	10.934	1.00	0.00
ATOM	887	02	CYT	82	-2.836	-3.979	10.509	1.00	0.00
ATOM	888	C3'	CYT	82 82	-6.493	-3.010	7.111	1.00	0.00
ATOM	889	C2'	CYT	82	-5.785	-4.117	7.887	1.00	0.00
ATOM	890	03'	CYT	82	-5.698	-2.411	6.099	1.00	0.00
ATOM	891	P	CYT	83	-5.490	-3.079	4.644	1.00	0.00
ATOM	892		CYT	83	-6.620	-3.995	4.377	1.00	0.00

					(190)				付用とし
	377								378
ATOM	893	0P2	CYT	83	-5.175	-1.998	3.683	1.00	0.00
ATOM	894	05'	CYT	83	-4.167	-3.963	4.863	1.00	0.00
ATOM	895	C5'	CYT	83	-2.874	-3.430	4.632	1.00	0.00
ATOM	896	C4'	CYT	83	-1.813	-4.435	5.088	1.00	0.00
ATOM	897	04'	CYT	83	-1.950	-4.673	6.471	1.00	0.00
ATOM	898	C1'	CYT	83	-1.282	-5.872	6.802	1.00	0.00
ATOM	899	N1	CYT	83	-2.029	-6.541	7.899	1.00	0.00
ATOM	900	C6	CYT	83	-3.377	-6.731	7.771	1.00	0.00
ATOM	901	C5	CYT	83	-4.120	-7.269	8.765	1.00	0.00
ATOM	902	C4	CYT	83	-3.419	-7.666	9.952	1.00	0.00
ATOM	903	N4	CYT	83	-4.080	-8.239	10.959	1.00	0.00
ATOM	904	N3	CYT	83	-2.097	-7.477	10.079	1.00	0.00
ATOM	905	C2	CYT	83	-1.372	-6.912	9.071	1.00	0.00
ATOM	906	02	CYT	83	-0.162	-6.744	9.203	1.00	0.00
ATOM	907	C3'	CYT	83	-1.986	-5.824	4.469	1.00	0.00
ATOM	908	C2'	CYT	83	-1.318	-6.710	5.520	1.00	0.00
ATOM	909	03'	CYT	83	-1.370	-5.892	3.192	1.00	0.00
ATOM	910	P	THY	84	-1.517	-7.185	2.227	1.00	0.00
ATOM	911		THY	84	-1.044	-6.810	0.876	1.00	0.00
ATOM	912		THY	84	-2.872	-7.754	2.397	1.00	0.00
ATOM	913	05'	THY	84	-0.467		2.842	1.00	0.00
ATOM	914	C5'	THY	84	0.926	-7.992	2.808	1.00	0.00
ATOM	915	C4'	THY	84 .	1.652	-9.114	3.552	1.00	0.00
ATOM	916	04'	THY	84	1.095	-9.242	4.851	1.00	0.00
ATOM	917	C1'	THY	84		-10.602	5.174	1.00	0.00
ATOM	918	N1	THY	84		-10.715	6.199	1.00	0.00
ATOM	919	C6	THY	84		-10.321	5.900	1.00	0.00
ATOM	920	C5	THY	84		-10.319	6.840	1.00	0.00
ATOM	921	C7	THY	84		-9.925	6.359	1.00	0.00
ATOM	922	C4	THY	84		-10.693	8.213	1.00	
ATOM	923	04	THY	84		-10.683	9.126	1.00	
ATOM	924	N3	THY	84		-11.093	8.443	1.00	0.00
ATOM	925	C2	THY	84		-11.128		1.00	0.00
ATOM	926	02	THY	84		-11.512	7.817	1.00	0.00
ATOM	927	C3'	THY	84		-10.479	2.864	1.00	
ATOM	928	C2'	THY	84		-11.221	3.816	1.00	
ATOM	929	03'	THY	84		-11.073	2.736	1.00	
ATOM	930	P	ADE	85		-12.482	1.986	1.00	
ATOM	931		ADE	85		-12.544	1.525	1.00	
ATOM	932		ADE	85		-12.695	0.980	1.00	
ATOM	933	05'	ADE	85		-13.562	3.151	1.00	
ATOM	934	C5'	ADE	85		-13.613	4.243	1.00	
ATOM	935	C4'	ADE	85		-14.395	5.375	1.00	
ATOM	936	04'	ADE	85		-13.828	5.700	1.00	
ATOM	937	C1'	ADE	85		-14.787	6.457	1.00	
ATOM	938	N9	ADE	85		-14.450	6.525	1.00	
ATOM	939	C8	ADE	85		-14.146	5.499	1.00	
ATOM	940	N7	ADE			-13.842	5.884	1.00	
ATOM	941	C5	ADE			-13.960	7.268	1.00	
ATOM	942	C6	ADE			-13.762	8.296	1.00	
N I UM	342	CO	NUL	ΟJ	3.200	13.702	0.230	1.00	0.00

379 943 N6 -4.529 -13.383 8.075 1.00 0.00 ATOM ADE 85 **ATOM** 944 N1 ADE 85 -2.875 -13.9549.567 1.00 ADE -1.622 -14.315 9.806 1.00 ATOM 945 C285 946 N3 ADE -0.643 - 14.5438.943 1.00 ATOM 85 ATOM 947 C4ADE -1.066 -14.340 7.667 1.00 85 **ATOM** 948 C3' ADE 85 2.756 -15.855 5.021 1.00 ATOM 949 C2' ADE 85 1.370 -16.060 5.652 1.00 03' ATOM 950 ADE 85 3.794 -16.668 5.542 1.00 P ADE ATOM 951 86 3.719 - 18.2775.584 1.00 OP1 ADE 5.612 1.00 **ATOM** 952 86 5.102 -18.800 OP2 ADE 2.790 -18.722 1.00 ATOM 953 86 4.517 05' ADE 3.049 - 18.5357.022 1.00 ATOM 954 86 ATOM 955 C5' ADE 3.661 -18.015 8.187 1.00 86 C4' ATOM 956 ADE 86 2.728 - 18.1169.392 1.00 **ATOM** 957 04' ADE 1.489 -17.475 9.122 1.00 86 C1' ADE ATOM 958 86 0.433 - 18.2779.610 1.00 N9 ADE -0.833 -17.9831.00 ATOM 959 86 8.902 68 ADE -1.080 -17.981 1.00 ATOM 960 86 7.551 ATOM 961 N7 ADE -2.278 -17.582 7.222 1.00 86 C5 ADE 1.00 ATOM 962 86 -2.883 - 17.3368.448 ATOM 963 С6 ADE 86 -4.175 -16.907 8.809 1.00 ATOM N6 ADE -5.104 -16.588 7.907 1.00 964 86 ATOM 965 N1 ADE 86 -4.481 -16.818 10.114 1.00 ATOM 966 C2ADE 86 -3.555 -17.123 11.017 1.00 ATOM 967 N3 ADE 86 -2.299 -17.50310.813 1.00 ATOM C4 ADE -2.021 -17.601 968 86 9.482 1.00 ATOM 969 C3' ADE 86 2.395 -19.560 9.775 1.00 ATOM 970 C2' ADE 86 0.940 - 19.6859.334 1.00 03' ADE ATOM 971 86 2.544 -19.681 11.179 1.00 972 P CYT 2.601 -21.110 11.919 ATOM 87 1.00 OP1 CYT 3.305 -20.900 ATOM 973 87 13.204 1.00 OP2 CYT 3.103 -22.117 ATOM 974 87 10.958 1.00 05' CYT ATOM 975 87 1.052 -21.411 12.243 1.00 ATOM 976 C5' CYT 87 0.492 - 20.96513.461 1.00 C4' CYT ATOM 977 87 -1.039 -21.013 13.456 1.00 ATOM 978 04' CYT 87 -1.613 -20.391 12.324 1.00 ATOM 979 C1' CYT -2.964 -20.811 12.266 87 1.00 ATOM 980 N1 CYT 87 -3.560 -20.576 10.924 1.00 ATOM 981 C6 CYT 87 -2.820 -20.828 9.802 1.00 C5 CYT -3.313 -20.640 ATOM 982 87 8.558 1.00 983 CYT -4.668 -20.185 1.00 0.00 ATOM C4 87 8.463 CYT ATOM 984 N4 87 -5.223 - 19.9557.272 1.00 0.00 ATOM 985 N3 CYT 87 -5.394 -19.941 9.563 1.00 0.00 **ATOM** 986 C2 CYT 87 -4.878 -20.136 10.810 1.00 0.00 ATOM 987 02 CYT 87 -5.575 -19.920 11.797 1.00 0.00 ATOM C3' CYT -1.617 -22.431 988 87 13.467 1.00 0.00 ATOM 989 C2' CYT 87 -2.833 -22.304 12.543 1.00 0.00 ATOM 03' CYT -1.929 -22.757 14.811 990 87 1.00 0.00ATOM 991 P CYT 88 -2.646 -24.137 15.243 1.00 0.00

ATOM

992

OP1 CYT

88

-2.323 -25.171 14.235 1.00 0.00

```
381
                                                                   382
ATOM
        993
            OP2 CYT
                         88
                                 -2.356 -24.381 16.673
                                                         1.00 0.00
             05'
                 CYT
ATOM
        994
                         88
                                 -4.208 -23.764
                                                 15.104
                                                          1.00
                                                                0.00
             C5'
                CYT
ATOM
        995
                         88
                                 -4.794 -22.728
                                                  15.873
                                                          1.00
                                                                0.00
             C4'
                 CYT
ATOM
        996
                         88
                                 -6.216 -22.450
                                                  15.377
                                                          1.00
                                                                0.00
             04'
                 CYT
ATOM
        997
                         88
                                 -6.192 -22.120
                                                 14.005
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        998
             C1'
                 CYT
                         88
                                 -7.424 -22.472
                                                 13.413
                                                          1.00
                                                                0.00
             N1
                 CYT
ATOM
        999
                         88
                                 -7.223 -22.714
                                                  11.962
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
       1000
             6
                 CYT
                         88
                                 -6.078 -23.333
                                                  11.536
                                                          1.00
                                                                0.00
             C5
                 CYT
ATOM
       1001
                         88
                                 -5.761 -23.421
                                                  10.228
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1002
             C4
                 CYT
                         88
                                 -6.709 -22.873
                                                   9.300
                                                          1.00
                                                                0.00
                                 -6.467 -22.905
ATOM
       1003
             N4
                 CYT
                         88
                                                   7.992
                                                         1.00
                                                                0.00
                 CYT
ATOM
       1004
             N3
                         88
                                 -7.875 -22.359
                                                   9.715
                                                          1.00
                                                                0.00
            C2
                 CYT
ATOM
       1005
                                 -8.175 -22.282
                                                  11.043
                                                          1.00
                         88
                                                                0.00
       1006
             02
                 CYT
ATOM
                         88
                                 -9.270 -21.859
                                                  11.403
                                                          1.00
                                                                 0.00
       1007 C3' CYT
ATOM
                         88
                                 -7.142 -23.667
                                                  15.498
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1008 C2'
                 CYT
                         88
                                 -7.783 -23.773
                                                  14.115
                                                          1.00
                                                                0.00
       1009 03'
                 CYT
ATOM
                         88
                                 -8.069 -23.427
                                                  16.543
                                                          1.00
                                                                 0.00
       1010 P
                 CYT
ATOM
                         89
                                 -9.226 -24.478
                                                  16.952
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1011 OP1 CYT
                         89
                                 -9.588 -24.236
                                                  18.366
                                                          1.00
                                                                 0.00
       1012 OP2 CYT
ATOM
                         89
                                 -8.810 -25.831
                                                  16.518
                                                          1.00
                                                                 0.00
       1013 05' CYT
ATOM
                                -10.465 -24.017
                                                  16.028
                                                                 0.00
                         89
                                                          1.00
             C5' CYT
                                                  16.189
ATOM
       1014
                         89
                                -11.078 -22.750
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1015 C4' CYT
                         89
                                -12.193 -22.568
                                                  15.152
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1016
            04' CYT
                         89
                                -11.654 -22.666
                                                  13.849
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1017 C1'
                 CYT
                                                  12.981
                         89
                                -12.560 -23.317
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1018 N1
                 CYT
                         89
                                -11.762 -24.013
                                                 11.936
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1019 C6
                 CYT
                         89
                                -10.668 -24.743
                                                 12.319
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1020 C5
                 CYT
                         89
                                 -9.776 -25.217
                                                  11.427
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 CYT
ATOM
       1021 C4
                         89
                                -10.040 -24.939
                                                  10.045
                                                          1.00
                                                                 0.00
       1022 N4
                 CYT
ATOM
                         89
                                 -9.194 -25.371
                                                   9.110
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N3
                 CYT
                                -11.140 -24.273
                                                   9.662
ATOM
       1023
                         89
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1024
             C2
                 CYT
                                -12.032 -23.803
                                                  10.584
                         89
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1025
             02
                 CYT
                         89
                                -13.049 -23.223
                                                  10.213
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C3'
                 CYT
ATOM
       1026
                         89
                                -13.277 -23.649
                                                  15.262
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C2'
                 CYT
ATOM
       1027
                         89
                                -13.263 -24.320
                                                  13.890
                                                          1.00
                                                                 0.00
             03' CYT
ATOM
       1028
                         89
                                -14.513 -23.031
                                                  15.585
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
       1029
             P
                         90
                                -15.872 -23.868
                                                  15.861
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP1 THY
       1030
ATOM
                         90
                                -16.775 -23.030
                                                  16.680
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1031
             OP2 THY
                                -15.503 -25.224
                                                  16.324
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         90
ATOM
       1032
             05' THY
                         90
                                -16.509 -23.997
                                                  14.385
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1033
             C5' THY
                         90
                                -16.991 -22.861
                                                  13.693
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1034
             C4'
                 THY
                                -17.298 -23.216
                                                  12.235
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         90
ATOM
       1035
             04'
                 THY
                         90
                                -16.138 -23.733
                                                  11.613
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             C1'
                 THY
       1036
                         90
                                -16.522 -24.666
                                                  10.629
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1037
             N1
                 THY
                         90
                                -15.356 -25.537
                                                  10.322
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1038
             6
                  THY
                                -14.735 -26.218
                                                  11.341
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         90
              C5
                  THY
ATOM
        1039
                         90
                                -13.605 -26.929
                                                  11.128
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C7
                  THY
ATOM
       1040
                         90
                                -13.031 -27.670
                                                  12.322
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C4
                  THY
        1041
                         90
                                -12.985 -26.982
                                                                 0.00
ATOM
                                                   9.824
                                                           1.00
ATOM
             04
                  THY
       1042
                         90
                                -11.938 -27.570
                                                   9.573 1.00
                                                                 0.00
```

```
383
                                                                    384
                                                          1.00 0.00
ATOM
       1043
             N3
                 THY
                         90
                                 -13.669 -26.285
                                                    8.836
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C2
                  THY
                         90
                                 -14.854 - 25.584
                                                    9.019
ATOM
       1044
                  THY
                                 -15.416 -25.059
                                                    8.061
ATOM
       1045
             02
                         90
                                                           1.00
                                                                  0.00
             C3'
                  THY
                         90
                                 -18.385 -24.293
                                                   12.077
                                                           1.00
                                                                  0.00
       1046
ATOM
ATOM
       1047
             C2'
                  THY
                         90
                                 -17.653 -25.416
                                                   11.335
                                                           1.00
                                                                  0.00
             03'
                 THY
                                 -19.464 -23.740
                                                   11.341
                                                                  0.00
       1048
                         90
                                                           1.00
ATOM
             P
                  ADE
                         91
                                 -20.846 -24.538
                                                   11.085
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
       1049
                                 -21.889 -23.549
                                                   10.733
                                                           1.00
                                                                  0.00
       1050
            OP1 ADE
                         91
ATOM
       1051
             OP2 ADE
                         91
                                 -21.070 -25.475
                                                   12.207
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
       1052
             05' ADE
                         91
                                 -20.503 -25.396
                                                    9.767
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
ATOM
        1053
             C5'
                  ADE
                         91
                                 -20.367 -24.774
                                                    8.505
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                 -19.774 -25.747
             C4'
                  ADE
                         91
                                                    7.482
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1054
        1055
              04'
                  ADE
                         91
                                 -18.465 -26.144
                                                    7.829
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1056
             C1'
                 ADE
                          91
                                 -18.168 -27.277
                                                    7.045
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              N9
                  ADE
                          91
                                 -16.991 -27.984
                                                    7.587
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1057
                  ADE
                                 -16.745 -28.319
                                                    8.892
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1058
              68
                          91
        1059
              N7
                  ADE
                          91
                                 -15.587 -28.888
                                                    9.090
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
                  ADE
              C5
                          91
                                 -15.039 -28.958
                                                    7.812 1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1060
ATOM
        1061
              60
                  ADE
                          91
                                 -13.817 -29.452
                                                    7.312 1.00
                                                                  0.00
                                                           1.00
                  ADE
                                 -12.870 -29.964
                                                                  0.00
ATOM
        1062
             N6
                          91
                                                    8.101
ATOM
        1063
             N1
                  ADE
                          91
                                 -13.606 -29.426
                                                    5.984
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C2
                  ADE
                          91
                                 -14.548 -28.924
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1064
                                                    5.190
ATOM
        1065
              N3
                  ADE
                          91
                                 -15.717 -28.395
                                                    5.535
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1066
              C4
                  ADE
                          91
                                 -15.905 -28.440
                                                    6.882
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1067
              C3,
                  ADE
                          91
                                 -20.548 -27.065
                                                    7.341
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C2'
ATOM
        1068
                  ADE
                          91
                                 -19.431 -28.108
                                                    7.217
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                                                  0.00
ATOM
        1069
              03'
                  ADE
                          91
                                 -21.392 -26.964
                                                    6.204
                                                            1.00
                  ADE
ATOM
        1070
              P
                          92
                                 -22.313 -28.180
                                                    5.673
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1071
              OP1 ADE
                          92
                                 -23.415 -27.608
                                                    4.870
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1072
              OP2 ADE
                          92
                                 -22.615 -29.081
                                                    6.806
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1073
              05'
                  ADE
                          92
                                 -21.310 -28.945
                                                     4.671
                                                            1.00
                                                                  0.00
        1074
              C5'
                  ADE
                                 -20.791 -28.297
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
                          92
                                                    3.524
ATOM
        1075
              C4'
                  ADE
                          92
                                 -19.716 - 29.164
                                                    2.863
                                                            1.00
                                                                  0.00
              04'
                  ADE
                                 -18.657 -29.410
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1076
                          92
                                                    3.775
        1077
              C1'
                  ADE
                          92
                                 -18.199 -30.730
                                                    3.591
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
                  ADE
                                  -17.461 -31.198
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1078
              N9
                          92
                                                     4.785
ATOM
        1079
              C8
                  ADE
                          92
                                 -17.884 -31.219
                                                    6.090
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1080
              N7
                  ADE
                          92
                                  -16.998 -31.659
                                                     6.938
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C5
                  ADE
                                  -15.907 -31.959
                                                            1.00
ATOM
        1081
                          92
                                                     6.135
                                                                  0.00
ATOM
        1082
              C6
                   ADE
                          92
                                  -14.630 -32.478
                                                     6.416
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1083
              N6
                   ADE
                                  -14.252 -32.776
                                                     7.660
                                                            1.00
                                                                  0.00
                          92
ATOM
        1084
              N1
                   ADE
                          92
                                  -13.769 -32.674
                                                     5.401
                                                            1.00
                                                                  0.00
 ATOM
        1085
              C2
                   ADE
                          92
                                  -14.160 -32.367
                                                     4.166
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1086
              N3
                   ADE
                          92
                                  -15.332 -31.881
                                                     3.768
                                                            1.00
                                                                   0.00
                   ADE
                                  -16.176 -31.689
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1087
              C4
                          92
                                                     4.817
              C3'
                  ADE
                                  -20.237 -30.544
                                                                  0.00
 ATOM
        1088
                          92
                                                     2.430
                                                            1.00
              C2'
                  ADE
                                  -19.522 -31.471
 ATOM
        1089
                                                     3.414
                                                            1.00
                                                                  0.00
                          92
 ATOM
        1090
              03'
                   ADE
                          92
                                  -19.861 -30.766
                                                     1.081
                                                            1.00
                                                                  0.00
 ATOM
        1091
              P
                   CYT
                          93
                                  -20.338 -32.066
                                                     0.252
                                                            1.00
                                                                  0.00
 ATOM
        1092
              OP1 CYT
                          93
                                  -20.665 -31.646
                                                   -1.128 1.00 0.00
```

	387							388
ATOM	15	CE	LYS	2	-8.687 -20.294	21.188	1.00	0.00
ATOM	16	NZ	LYS	2	-9.981 -20.084	20.513	1.00	0.00
ATOM	17	C	LYS	2	-4.188 -18.210	23.393	1.00	0.00
ATOM	18	0	LYS	2	-4.584 -18.652	24.470	1.00	0.00
ATOM	19	N	HIS	3	-3.549 -17.044	23.255	1.00	0.00
ATOM	20	CA	HIS	3	-3.174 -16.081	24.284	1.00	0.00
ATOM	21	CB	HIS	3	-4.226 -15.890	25.387	1.00	0.00
ATOM	22	CG	HIS	3	-5.595 -15.522	24.875		0.00
ATOM	23		HIS	3	-6.552 -16.476	24.563	1.00	0.00
ATOM	24		HIS	3	-7.646 -15.821	24.139	1.00	0.00
ATOM	25		HIS	3	-7.488 -14.496	24.148	1.00	0.00
ATOM	26		HIS	3	-6.190 -14.312	24.612	1.00	0.00
ATOM	27	C	HIS	3	-1.820 -16.471	24.875	1.00	0.00
ATOM	28	0	HIS	3	-1.646 -17.597	25.338	1.00	0.00
ATOM	29	N	ARG	4	-0.869 -15.527	24.868	1.00	0.00
ATOM	30	CA	ARG	4	0.482 -15.690	25.397	1.00	0.00
ATOM	31	CB	ARG	4	0.451 -15.997	26.906	1.00	0.00
ATOM	32	CG	ARG	4	-0.348 -14.962	27.713	1.00	0.00
ATOM	33	CD	ARG	4	-0.519 -15.424	29.164	1.00	0.00
ATOM	34	NE	ARG	4	-1.361 -16.628	29.237	1.00	0.00
ATOM	35	CZ	ARG	4	-1.671 -17.290	30.363	1.00	0.00
ATOM	36		ARG	4	-1.231 -16.851	31.551	1.00	0.00
ATOM	37		ARG	4	-2.424 -18.396	30.297	1.00	0.00
ATOM	38	С	ARG	4	1.256 -16.757	24.614	1.00	0.00
ATOM	39	0	ARG	4	1.807 -17.683	25.204	1.00	0.00
ATOM	40	N	ALA	5	1.299 -16.613	23.285	1.00	0.00
ATOM	41	CA	ALA	5	1.994 -17.521	22.381	1.00	0.00
ATOM	42	CB	ALA	5	1.014 -17.984	21.298	1.00	0.00
ATOM	43	C	ALA	5	3.201 -16.822	21.749	1.00	0.00
ATOM	44	0	ALA	5	3.314 -15.599	21.814	1.00	0.00
ATOM	45	N	ARG	6	4.084 -17.624	21.139	1.00	0.00
ATOM	46	CA	ARG	6	5.293 -17.238	20.430	1.00	0.00
ATOM	47	CB	ARG	6	6.266 -16.459	21.317	1.00	0.00
ATOM	48	CG	ARG	6	7.502 -16.055	20.499	1.00	0.00
ATOM	49	CD	ARG	6	8.033 -14.714	21.000	1.00	0.00
ATOM	50	NE	ARG	6	7.194 -13.592	20.543	1.00	0.00
ATOM	51	CZ	ARG	6	7.347 -12.870	19.416	1.00	0.00
ATOM	52	NH1	ARG	6	6.484 -11.878	19.169	1.00	0.00
ATOM	53	NH2	ARG	6	8.341 -13.128	18.552	1.00	0.00
ATOM	54	C	ARG	6	5.916 -18.502	19.847	1.00	0.00
ATOM	55	0	ARG	6	6.782 -19.098	20.484	1.00	0.00
ATOM	56	N	LYS	7	5.471 -18.912	18.650	1.00	0.00
ATOM	57	CA	LYS	7	5.979 -20.101	17.966	1.00	0.00
ATOM	58	CB	LYS	7	5.777 -21.382	18.803	1.00	0.00
ATOM	59	CG	LYS	7	4.304 -21.668	19.120	1.00	0.00
ATOM	60	CD	LYS	7	4.134 -23.044	19.782	1.00	0.00
ATOM	61	CE	LYS	7	4.961 -23.238	21.062	1.00	0.00
ATOM	62	NZ	LYS	7	4.783 -22.130	22.021	1.00	0.00
ATOM	63	C	LYS	7	5.444 -20.295	16.540	1.00	0.00
ATOM	64	0	LYS	7	5.560 -21.404	16.019	1.00	0.00

	200 -				(100)				200
A TROM	389	**	100		4 077	10.075	45 050	4 00	390
ATOM	65	N	ARG	8		-19.275	15.879	1.00	0.00
. ATOM	66	CA	ARG	8		-19.459	14.507	1.00	0.00
ATOM	67	CB	ARG	8		-18.208	13.991	1.00	0.00
ATOM	68	CG	ARG	8		-17.977	14.665	1.00	0.00
ATOM	69	CD	ARG	8		-19.114	14.407	1.00	0.00
ATOM	70	NE	ARG	8	-0.024	-18.733	14.760	1.00	0.00
ATOM	71	CZ	ARG	8	-0.855	-18.030	13.979	1.00	0.00
ATOM	72	NH1	ARG	8	-0.446	-17.580	12.789	1.00	0.00
ATOM	73	NH2	ARG	8	-2.103	-17.782	14.395	1.00	0.00
ATOM	74	C	ARG	8	5.617	-19.781	13.632	1.00	0.00
ATOM	75	0	ARG	8	6.541	-18.975	13.534	1.00	0.00
ATOM	76	N	GLN	9	5.625	-20.964	13.011	1.00	0.00
ATOM	77	CA	GLN	9	6.740	-21.392	12.190	1.00	0.00
ATOM	78	CB	GLN	9	6.800	-22.925	12.134	1.00	0.00
ATOM	79	CG	GLN	9	6.941	-23.545	13.528	1.00	0.00
ATOM	80	CD	GLN	9	7.286	-25.029	13.432	1.00	0.00
ATOM	81		GLN	9		-25.828	12.946	1.00	0.00
ATOM	82		GLN	9		-25.410	13.881	1.00	0.00
ATOM	83	C	GLN	9		-20.766	10.801	1.00	0.00
ATOM	84	0	GLN	9		-21.386	9.884	1.00	0.00
ATOM	85	N	ALA	10		-19.550	10.642	1.00	0.00
ATOM	86	CA	ALA	10		-18.861	9.358	1.00	0.00
ATOM	87	СВ	ALA	10		-17.559	9.484	1.00	0.00
ATOM	88	C	ALA	10		-19.809	8.351	1.00	0.00
ATOM	89	0	ALA	10		-20.315	8.617	1.00	0.00
ATOM	90	N	TRP	11		-20.088	7.223	1.00	0.00
ATOM	91	CA	TRP	11		-21.020	6.259	1.00	0.00
ATOM	92	CB	TRP	11		-21.404	5.187	1.00	0.00
ATOM	93	CG	TRP	11		-22.216	5.620	1.00	0.00
ATOM	94	CD1		11		-21.893	6.582	1.00	0.00
ATOM	95	NE1	TRP	11		-22.869	6.689	1.00	0.00
ATOM	96		TRP	11		-23.893	5.799	1.00	0.00
ATOM	97		TRP	11		-25.090	5.524	1.00	0.00
ATOM	98		TRP	11		-25.943	4.539	1.00	0.00
ATOM	99		TRP	11		-25.592	3.832	1.00	0.00
ATOM	100		TRP	11		-24.385	4.106	1.00	0.00
ATOM	101		TRP	11		-23.504	5.103	1.00	0.00
ATOM	102	C	TRP	11		-20.430	5.657	1.00	0.00
ATOM	102	0	TRP	11		-19.245	5.330	1.00	0.00
ATOM	103	N	LEU	12		-21.283	5.541	1.00	0.00
ATOM	104	CA	LEU	12		-20.968	5.021	1.00	0.00
ATOM	103	CB	LEU	12		-21.419			
ATOM	107	CG	LEU			-22.915	6.026	1.00	0.00
ATOM	107		LEU	12 12		-22.915 -23.513	6.398	1.00	0.00 $0.00$
ATOM	108		LEU	12			6.495		
		CDZ				-23.118	7.742	1.00	0.00
ATOM ATOM	110	0	LEU Leu	12 12		-21.631 -22.404	3.658	1.00	0.00
ATOM	111 112	N	TRP				3.226	1.00	0.00
ATOM		CA	TRP			-21.335	2.987	1.00	0.00
	113					-21.903	1.678	1.00	0.00
ATOM	114	CB	TRP	13	14.413	-21.672	1.154	1.00	0.00

```
391
                                                                   392
ATOM
        115 CG TRP
                                                   1.802 1.00 0.00
                         13
                                 15.441 -22.556
                                                   3.105 1.00 0.00
                                 15.689 -22.471
        116
             CD1 TRP
                         13.
ATOM
                                 16.642 -23.369
ATOM
             NE1 TRP
                         13
                                                   3.515 1.00
                                                                0.00
        117
                                                   2.445 1.00
                                                                0.00
             CE2 TRP
                         13
                                 17.048 -24.133
ATOM
        118
             CZ2 TRP
                                 17.960 -25.190
                                                   2.341 1.00
                                                                0.00
ATOM
        119
                         13
             CH2 TRP
                                 18.132 -25.814
                                                   1.101 1.00
                                                                0.00
ATOM
        120
                         13
                                                                0.00
ATOM
             CZ3 TRP
                                 17.398 -25.364
                                                  -0.007
                                                          1.00
        121
                         13
ATOM
        122
             CE3 TRP
                                  16.495 -24.290
                                                   0.098
                                                          1.00
                                                                0.00
                         13
                                                          1.00
             CD2 TRP
                                  16.290 -23.645
                                                   1.331
                                                                0.00
ATOM
        123
                         13
        124
             C
                                  12.754 -23.399
                                                   1.659
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
                 TRP
                         13
ATOM
             0
                  TRP
                                  12.102 -23.835
                                                   0.739
                                                          1.00
                                                                0.00
        125
                         13
ATOM
        126
             N
                  GLU
                                  13.301 -24.186
                                                   2.601
                                                          1.00
                                                                0.00
                         14
ATOM
        127
             CA
                 GLU
                                  13.210 -25.631
                                                   2.521
                                                          1.00
                                                                0.00
                         14
ATOM
        128
              CB.
                 GLU
                         14
                                  14.311 -26.359
                                                   3.297
                                                          1.00 0.00
ATOM
        129
              CG
                 GLU
                         14
                                  14.477 -27.792
                                                   2.765
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CD
                 GLU
                                  15.896 -28.311
                                                   2.949
                                                          1.00
                                                                 0.00
        130
                         14
ATOM
        131
              OE1 GLU
                         14
                                  16.468 -28.725
                                                   1.916 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         132
              OE2 GLU
                                  16.384 -28.269
                                                   4.098 1.00
                                                                 0.00
                         14
                                  11.781 -26.159
ATOM
         133
             C
                  GLU
                         14
                                                   2.643 1.00
                                                                 0.00
ATOM
              0
                  GLU
                                  11.435 -27.141
                                                   1.990 1.00
                                                                 0.00
         134
                         14
         135
             N
                  GLU
                         15
                                  10.941 -25.492
                                                   3.439
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
         136
              CA
                  GLU
                         15
                                   9.545 -25.871
                                                    3.583 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         137
              CB
                  GLU
                         15
                                   8.912 -25.128
                                                    4.766
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  GLU
ATOM
         138
              CG
                          15
                                   9.474 -25.549
                                                    6.129
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CD GLU
                                  8.854 -26.858
ATOM
         139
                         15
                                                    6.611
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         140
              OE1 GLU
                          15
                                   7.795 -26.787
                                                    7.276 1.00
                                                                 0.00
              OE2 GLU
                                   9.442 -27.919
         141
                          15
                                                    6.319 1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C
                  GLU
                                   8.822 -25.570
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         142
                                                    2.261
                          15
         143
              0
                  GLU
                                   8.132 -26.435
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         15
                                                    1.728
ATOM
         144
              N
                  ASP
                                   8.988 -24.358
                                                    1.716
                                                          1.00
                                                                 0.00
                          16
              CA ASP
                                   8.370 -23.949
                                                                 0.00
ATOM
         145
                          16
                                                    0.452 1.00
ATOM
         146
              CB
                 ASP
                          16
                                   8.577 -22.443
                                                   0.238
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         147
              CG
                  ASP
                                   7.835 -21.587
                                                    1.257
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          16
ATOM
         148
              OD1 ASP
                          16
                                   6.746 -22.011
                                                    1.695
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              OD2 ASP
                                   8.337 -20.484
                                                    1.560
                                                          1.00
                                                                 0.00
         149
                          16
ATOM
         150
              C
                  ASP
                          16
                                   8.938 -24.726
                                                  -0.743
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         151
              0
                  ASP
                          16
                                   8.232 -25.016
                                                  -1.704
                                                           1.00
                                                                 0.00
              N
                  LYS
                                  10.226 -25.058
                                                  -0.669
ATOM
         152
                          17
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CA LYS
                                  11.025 -25.799
                                                  -1.632
                                                           1.00
ATOM
         153
                          17
                                                                 0.00
         154
              CB LYS
                          17
                                  12.495 -25.835
                                                  -1.134
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
              CG LYS
                          17
                                  13.325 -26.943
                                                  -1.803
                                                           1.00
                                                                 0.00
         155
              CD
                  LYS
                                                  -1.388
ATOM
         156
                          17
                                  14.799 -26.850
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         157
              CE
                 LYS
                          17
                                  15.564 -28.160
                                                  -1.627
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         158
              NZ LYS
                          17
                                  15.366 -29.132
                                                  -0.532
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         159
              С
                  LYS
                          17
                                  10.392 -27.189
                                                  -1.727
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         160
              0
                  LYS
                                  10.037 -27.649
                                                  -2.812
                                                          1.00
                                                                 0.00
                          17
 ATOM
         161
              N
                  ASN
                          18
                                  10.243 -27.833
                                                  -0.565
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CA
                                   9.640 -29.144
                                                  -0.401
         162
                  ASN
                          18
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
 ATOM
         163
              CB
                  ASN
                          18
                                   9.715 -29.514
                                                    1.088
                                                          1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         164
              CG ASN
                          18
                                   9.039 -30.830
                                                    1.443 1.00 0.00
```

. .

	202				(100)			141/01 - 0 (
1 TOU	393	001	LON	10	0 500 01 505	0 570	1 00	394
ATOM	165	OD1		18	8.530 -31.535	0.578	1.00	0.00
ATOM	166	ND2		18	9.032 -31.160	2.734	1.00	0.00
ATOM	167	C	ASN	18	8.205 -29.113	-0.933	1.00	0.00
ATOM	168	0	ASN	18	7.845 -29.930	-1.778	1.00	0.00
ATOM	169	N	LEU	19	7.398 -28.163	-0.451	1.00	0.00
ATOM	170	CA	LEU	19	6.006 -27.969	-0.842	1.00	0.00
ATOM	171	CB	LEU	19	5.501 -26.672	-0.191	1.00	0.00
ATOM	172	CG	LEU	19	4.004 -26.397	-0.368	1.00	0.00
ATOM	173	CD1		19	3.138 -27.316	0.496	1.00	0.00
ATOM	174	CD2		19	3.744 -24.943	0.056	1.00	0.00
ATOM	175	C	LEU	19	5.871 -27.917	-2.366	1.00	0.00
ATOM	176	0	LEU	19	5.132 -28.702	-2.955	1.00	0.00
ATOM	177	N	ARG	20	6.597 -26.987	-2.995	1.00	0.00
ATOM	178	CA	ARG	20	6.610 -26.772	-4.433	1.00	0.00
ATOM	179	CB	ARG	20	7.575 -25.621	-4.741	1.00	0.00
ATOM	180	CG	ARG	20	7.653 -25.293	-6.237	1.00	0.00
ATOM	181	CD	ARG	20	8.467 -24.014		1.00	0.00
ATOM	182	NE	ARG	20	9.838 -24.144	-5.947	1.00	0.00
ATOM	183	CZ	ARG	20	10.732 -23.145	-5.871	1.00	0.00
ATOM	184	NH1	ARG	20	11.935 -23.368	-5.327	1.00	0.00
ATOM	185	NH2	ARG	20	10.427 -21.926	-6.337	1.00	0.00
ATOM	186	C	ARG	20	6.981 -28.055	-5.176	1.00	0.00
ATOM	187	0	ARG	20	6.265 -28.462	-6.090	1.00	0.00
ATOM	188	N	SER	21	8.092 -28.690	-4.783	1.00	0.00
ATOM	189	CA	SER	21	8.554 -29.929	-5.394	1.00	0.00
ATOM	190	CB	SER	21	9.814 -30.420	-4.670	1.00	0.00
ATOM	191	0G	SER	21	10.320 -31.585	-5.290	1.00	0.00
ATOM	192	C	SER	21	7.437 -30.975	-5.348	1.00	0.00
ATOM	193	0	SER	21	7.087 -31.566	-6.370	1.00	0.00
ATOM	194	N	GLY	22	6.874 -31.182	-4.156	1.00	0.00
ATOM	195	CA	GLY	22	5.799 -32.119	-3.912	1.00	0.00
ATOM	196	C	GLY	22	4.619 -31.866	-4.846	1.00	0.00
ATOM	197	0	GLY	22	4.246 -32.756	-5.603	1.00	0.00
ATOM	198	N	VAL	23	4.033 -30.665	-4.790	1.00	0.00
ATOM	199	CA	VAL	23	2.891 -30.283	-5.613	1.00	0.00
ATOM	200	CB	VAL	23	2.491 -28.823	-5.334	1.00	0.00
ATOM	201	CG1	VAL	23	1.432 -28.338	-6.333	1.00	0.00
ATOM	202	CG2	VAL	23	1.899 -28.698	-3.926	1.00	0.00
ATOM	203	C	VAL	23	3.164 -30.524	-7.099	1.00	0.00
ATOM	204	0	VAL	23	2.332 -31.107	-7.788	1.00	0.00
ATOM	205	N	ARG	24	4.317 -30.081	-7.609	1.00	0.00
ATOM	206	CA	ARG	24	4.644 -30.264	-9.017	1.00	0.00
ATOM	207	CB	ARG	24	5.918 -29.484	-9.370	1.00	0.00
ATOM	208	CG	ARG	24	5.662 -27.970	-9.323	1.00	0.00
ATOM	209	CD	ARG	24	6.932 -27.175		1.00	0.00
ATOM	210	NE	ARG	24	7.371 -27.377	-11.043	1.00	0.00
ATOM	211	CZ	ARG	24	6.865 -26.758	-12.124	1.00	0.00
ATOM	212	NH1	ARG	24	5.851 -25.890	-12.005	1.00	0.00
ATOM	213	NH2	ARG	24	7.380 -27.012	-13.334	1.00	0.00
ATOM	214	C	ARG	24	4.771 -31.744	-9.397	1.00	0.00

```
395
                                                                  396
ATOM
        215 0
                 ARG
                        24
                                  4.377 -32.125 -10.497 1.00 0.00
ATOM
        216
            N
                 LYS
                         25
                                  5.327 -32.576 -8.510
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        217
             CA
                 LYS
                         25
                                  5.537 -33.996 -8.770
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        218
            CB
                 LYS
                         25
                                  6.671 -34.513 -7.879
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        219
             CG
                 LYS
                         25
                                  8.015 -33.915
                                                 -8.321
                                                          1.00
                                                                0.00
        220
             CD
                 LYS
                         25
                                  9.148 - 34.282
                                                 -7.358
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
ATOM
        221
             CE
                 LYS
                         25
                                  9.445 - 35.785
                                                 -7.389
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        222 NZ
                 LYS
                         25
                                 10.619 -36.116 -6.568
                                                          1.00
                                                                0.00
                                  4.293 -34.873 -8.599
ATOM
        223
             C
                 LYS
                         25
                                                          1.00
                                                                0.00
                 LYS
                                  4.108 -35.803 -9.383
                                                                0.00
ATOM
        224
             0
                         25
                                                          1.00
                  TYR
                                                 -7.576
                                                                0.00
ATOM
        225
             N
                         26
                                  3.470 -34.623
                                                          1.00
                 TYR
                                                 -7.257
                                                                0.00
ATOM
        226
             CA
                         26
                                  2.301 -35.441
                                                          1.00
             CB
                 TYR
                                  2.466 -35.977
                                                 -5.829
ATOM
        227
                         26
                                                          1.00
                                                                0.00
             CG TYR
                                  3.851 - 36.540
                                                 -5.547
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        228
                         26
        229
             CD1 TYR
                                  4.374 -37.562
                                                 -6.361
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
                         26
             CE1 TYR
                                                                0.00
        230
                                  5.658 -38.076
                                                 -6.116
                                                          1.00
ATOM
                         26
             CZ TYR
                                  6.426 -37.570
                                                 -5.052
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        231
                         26
             OH TYR
                                  7.674 -38.066
                                                 -4.810
                                                          1.00
                                                                0.00
        232
                         26
ATOM
ATOM
        233
             CE2 TYR
                                  5.907 -36.552
                                                  -4.237
                                                          1.00
                                                                0.00
                         26
                                                                0.00
ATOM
        234
             CD2 TYR
                         26
                                  4.623 -36.037
                                                 -4.483
                                                          1.00
ATOM
        235
             C
                  TYR
                         26
                                  0.960 -34.728
                                                 -7.443
                                                         1.00
                                                                0.00
             0
                  TYR
                                 -0.077 -35.311
                                                 -7.131
                                                                0.00
         236
                         26
                                                         1.00
ATOM
ATOM
         237
             N
                  GLY
                         27
                                  0.957 -33.492
                                                 -7.950
                                                          1.00
                                                                0.00
         238
             CA
                  GLY
                         27
                                 -0.257 -32.725
                                                 -8.184
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         239
              C
                  GLY
                                 -0.770 -32.053
                                                 -6.911
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
                         27
ATOM
         240
             0
                  GLY
                         27
                                 -0.495 -32.503
                                                 -5.798
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
         241
             N
                  GLU
                         28
                                 -1.530 -30.968
                                                 -7.090
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         242
             CA
                 GLU
                         28
                                 -2.121 -30.208
                                                  -5.999
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         243
              CB
                  GLU
                         28
                                 -2.482 -28.802
                                                  -6.504
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CG
                  GLU
                         28
                                 -2.658 -27.803
                                                  -5.354
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         244
ATOM
         245
              CD
                  GLU
                         28
                                 -3.054 - 26.420
                                                  -5.852
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         246
              OE1 GLU
                         28
                                 -2.363 -25.895
                                                  -6.755
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         247
              OE2 GLU
                         28
                                 -4.038 -25.868
                                                  -5.312
                                                          1.00
                                                                0.00
             C
                  GLU
                                 -3.348 -30.961
                                                  -5.473
                                                          1.00
ATOM
         248
                         28
                                                                 0.00
ATOM
         249
             0
                  GLU
                         28
                                 -3.928 -31.782
                                                  -6.183
                                                          1.00
                                                                0.00
                  GLY
                                 -3.743 -30.684
                                                  -4.228
ATOM
         250
              N
                         29
                                                          1.00
                                                                0.00
              CA
                  GLY
                         29
                                 -4.892 -31.318
                                                 -3.597
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         251
              C
                  GLY
                                  -4.632 -32.779
                                                 -3.229
 ATOM
         252
                         29
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         253
              0
                  GLY
                         29
                                  -5.577 -33.536 -3.026
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         254
              N
                  ASN
                         30
                                  -3.354 -33.169
                                                  -3.137
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CA ASN
                                                  -2.789
 ATOM
         255
                         30
                                  -2.910 -34.511
                                                          1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         256
              CB
                 ASN
                         30
                                  -2.286 -35.191
                                                  -4.019
                                                          1.00
                                                                 0.00
 ATOM
              CG ASN
                         30
                                  -3.267 -35.329
                                                  -5.181
                                                          1.00
                                                                 0.00
         257
         258
              OD1 ASN
                         30
                                  -4.431 -35.667
                                                  -4.985
                                                          1.00
                                                                 0.00
 ATOM
              ND2 ASN
                                  -2.804 -35.085
 ATOM
         259
                         30
                                                  -6.407
                                                           1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         260
              C
                  ASN
                         30
                                  -1.898 -34.355
                                                  -1.658
                                                          1.00
                                                                 0.00
              0
                  ASN
                                  -0.776 -34.857
                                                  -1.733
 ATOM
         261
                         30
                                                          1.00
                                                                 0.00
              N
                  TRP
                                  -2.293 -33.639
                                                  -0.602 1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         262
                         31
 ATOM
              CA TRP
                          31
                                  -1.422 -33.388
                                                   0.536
                                                          1.00
                                                                 0.00
         263
```

-1.959 -32.276

1.443 1.00 0.00

ATOM

CB TRP

31

264

	207				(200)				200	, 0	•
ATOH	397	cc	ממד	21	2 000	21 102	0.047	1 00	398		
ATOM	265		TRP	31		-31.192			0.00		
ATOM	266	CD1		31		-31.010		1.00	0.00		
ATOM	267	NE1		31	-4.181		-0.315	1.00	0.00		
ATOM	· 268	CE2		31		-29.375		1.00	0.00		
ATOM	269	CZ2		31	-2.723		-1.614	1.00	0.00		
ATOM	270	CH2		31	-1.384		-1.880	1.00	0.00		
ATOM	271	CZ3		31	-0.349		-1.300	1.00	0.00		
ATOM	272	CE3		31		-29.806		1.00	0.00		
ATOM	273	CD2		31		-30.158		1.00	0.00		
ATOM	274		TRP	31		-34.697		1.00	0.00		
ATOM	275		TRP	31		-34.757		1.00	0.00		
ATOM	276	N	SER	32		-35.754		1.00	0.00		
ATOM	277	CA	SER	32	-1.488	-37.079	1.583	1.00	0.00		
MOTA	278	CB	SER	32		-38.118		1.00	0.00		
ATOM	279	0G	SER	32	-3.808	-37.807	1.732	1.00	0.00		
ATOM	280	C	SER	32	-0.157	-37.498	0.955	1.00	0.00		
ATOM	281	0	SER	32	0.758	-37.931	1.651	1.00	0.00		
MOTA	282	N	LYS	33	-0.048	-37.357	-0.372	1.00	0.00		
ATOM	283	CA	LYS	33	1.158	-37.696	-1.110	1.00	0.00		
ATOM	284	CB	LYS	33	0.922	-37.577	-2.626	1.00	0.00		
ATOM	285	CG	LYS	33	0.007	-38.683	-3.174	1.00	0.00		
ATOM	286	CD	LYS	33	0.770	-39.991	-3.433	1.00	0.00		
ATOM	287	CE	LYS	33	1.548	-39.935	-4.756	1.00	0.00		
ATOM	288	NZ	LYS	33	2.443	-41.095	-4.907	1.00	0.00		
ATOM	289	С	LYS	33	2.295	-36.780	-0.668	1.00	0.00		
ATOM	290	0	LYS	33	3.381	-37.266	-0.361	1.00	0.00		
ATOM	291	N	ILE	34	2.051	-35.464	-0.637	1.00	0.00		
ATOM	292	CA	ILE	34	3.073	-34.499	-0.253	1.00	0.00		
ATOM	293	CB	ILE	34	2.528	-33.054	-0.307	1.00	0.00		
ATOM	294	CG2	ILE	34	3.654	-32.059	-0.002	1.00	0.00		
ATOM	295	CG1	ILE	34	1.875	-32.647	-1.645	1.00	0.00		
ATOM	296	CD1	ILE	34	2.483	-33.283	-2.886	1.00	0.00		
ATOM	297	C	ILE	34	3.697	-34.853	1.106	1.00	0.00		
ATOM	298	0	ILE	34	4.915	-35.011	1.198	1.00	0.00		
ATOM	299	N	LEU	35	2.876	-34.983	2.156	1.00	0.00		
ATOM	300	CA	LEU	35	3.340	-35.304	3.502	1.00	0.00		
ATOM	301	CB	LEU	35	2.258	-34.999	4.555	1.00	0.00		
ATOM	302	CG	LEU	35 ົ	1.047	-35.951	4.587	1.00	0.00		
ATOM	303	CD1	LEU	35	1.258	-37.133	5.544	1.00	0.00		
ATOM	304	CD2	LEU	35	-0.203	-35.185	5.045	1.00	0.00		
ATOM	305	C	LEU	35	3.930	-36.715	3.605	1.00	0.00		
ATOM	306	0	LEU	35	4.856	-36.929	4.383	1.00	0.00		
ATOM	307	N	LEU	36	3.412	-37.680	2.832	1.00	0.00		
ATOM	308	CA	LEU	36	3.911	-39.051	2.858	1.00	0.00		
ATOM	309	CB	LEU	36	2.948	-39.969	2.085	1.00	0.00		
ATOM	310	CG	LEU	36	3.367	-41.450	2.040	1.00	0.00		
ATOM	311	CD1	LEU	36	2.111	-42.330	1.999	1.00	0.00		
ATOM	312	CD2	LEU	36	4.219	-41.781	0.805	1.00	0.00		
ATOM	313	C	LEU	36	5.328	-39.102	2.296	1.00	0.00		
ATOM	314	0	LEU	36	6.220	-39.686	2.908	1.00	0.00		

399 ATOM 315 N HIS 37 5.529 - 38.5021.120 1.00 0.00 ATOM 316 CA HIS 37 6.815 - 38.4900.447 1.00 ATOM 317 CB HIS 37 6.627 - 38.109-1.0251.00 ATOM 318 CG HIS 37 5.884 -39.169 -1.8011.00 ATOM 319 ND1 HIS 37 6.382 -40.452 -1.956 1.00 CE1 HIS ATOM 320 37 5.491 -41.143 -2.6851.00 NE2 HIS 4.428 -40.414 ATOM 321 37 -3.0341.00 322 CD2 HIS ATOM 37 4.685 -39.166 -2.470 1.00 C HIS ATOM 323 37 7.836 -37.590 1.138 1.00 324 0 HIS ATOM 37 9.019 -37.928 1.131 1.00 TYR ATOM 325 N 38 7.411 - 36.4571.714 1.00 TYR 8.323 -35.526 ATOM 326 CA 38 2.367 1.00 327 CB TYR ATOM 38 8.571 -34.337 1.441 1.00 CG TYR 38 9.050 -34.682 ATOM 328 0.048 1.00 329 CD1 TYR -1.078ATOM 38 8.274 -34.349 1.00 CE1 TYR 8.729 -34.672 -2.368ATOM 330 38 1.00 CZ TYR 331 38 9.963 -35.330 -2.5281.00 ATOM OH TYR 38 10.428 -35.654 -3.7681.00 ATOM 332 CE2 TYR ATOM 333 38 10.737 -35.662 -1.4041.00 **ATOM** 334 CD2 TYR 38 10.282 -35.338 -0.1181.00 ATOM 335 C TYR 38 7.778 -35.002 3.692 1.00 336 0 TYR 6.624 -34.593 ATOM 38 3.775 1.00 0.00 ATOM 337 N LYS 39 8.633 -34.984 4.720 1.00 LYS ATOM 338 CA 39 8.303 -34.470 6.039 1.00 ATOM 339 CBLYS 39 9.110 -35.241 7.095 1.00 CG LYS ATOM 340 39 8.767 -34.794 8.521 1.00 ATOM 341 CD LYS 39 9.473 -35.674 9.557 1.00 ATOM 342 CE LYS 39 9.136 -35.181 10.971 1.00 **ATOM** 343 NZ LYS 39 9.819 -35.978 12.006 1.00 ATOM 344 C LYS 39 8.606 -32.968 6.063 1.00 ATOM 345 0 LYS 39 9.517 -32.507 5.377 1.00 PHE N 7.837 -32.217 ATOM 346 40 6.858 1.00 CA PHE ATOM 347 40 7.958 -30.774 7.038 1.00 PHE ATOM 348 CB 6.688 -30.093 6.515 1.00 40 CG PHE 6.425 -30.193 ATOM 349 40 5.025 1.00 CD1 PHE ATOM 350 40 6.001 - 31.4044.447 1.00 ATOM 351 CE1 PHE 5.754 -31.479 3.067 1.00 40 ATOM 352 CZ PHE 40 5.922 -30.342 2.255 1.00 CE2 PHE ATOM 353 40 6.346 - 29.1352.832 1.00 ATOM 354 CD2 PHE 40 6.598 -29.057 4.210 1.00 **ATOM** C PHE 8.155 -30.486 1.00 0.00 355 40 8.534 ATOM 356 0 PHE 40 8.289 -31.426 9.318 1.00 0.00 N ASN 8.165 -29.209 ATOM 357 41 8.951 1.00 0.00 ATOM 358 CA ASN 41 8.333 -28.850 10.359 1.00 0.00 ATOM 359 CBASN 8.312 -27.322 10.564 1.00 0.00 41 CG ASN 9.381 -26.527 ATOM 360 41 9.814 1.00 0.00 ATOM OD1 ASN 9.168 -25.355 361 9.510 1.00 0.00 41 ATOM 362 ND2 ASN 41 10.530 -27.132 9.511 1.00 0.00 ATOM 363 C ASN 41 7.238 -29.512 11.205 1.00 0.00 ATOM 0 ASN 7.523 -30.367 364 41 12.040 1.00 0.00

		401							400
٨	TOM	401 365	N	A CNI	42	5.983 -29.112	10 070	1 00	402
			N	ASN				1.00	0.00
	TOM	366	CA	ASN	42	4.785 -29.611	11.637	1.00	0.00
	TOM	367	CB	ASN	42	4.776 -29.206	13.122	1.00	0.00
	MOT	368	CG	ASN	42	3.546 -29.739	13.851	1.00	0.00
	MOT	369	OD1		42	2.745 -28.974	14.380	1.00	0.00
	TOM	370	ND2		42	3.393 -31.063	13.897	1.00	0.00
	MOT	371	C	ASN	42	3.601 -29.025	10.869	1.00	0.00
A	TOM	372	0	ASN	42	2.835 -28.220	11.394	1.00	0.00
A	MOT	373	N	ARG	43	3.491 -29.410	9.594	1.00	0.00
A	TOM	374	CA	ARG	43	2.486 -28.904	8.674	1.00	0.00
A	MOT	375	CB	ARG	43	3.185 -28.454	7.382	1.00	0.00
A	MOTA	376	CG	ARG	43	4.473 -27.654	7.620	1.00	0.00
A	MOTA	377	CD	ARG	43	4.307 -26.384	8.457	1.00	0.00
A	MOTA	378	NE	ARG	43	5.559 -25.624	8.416	1.00	0.00
A	MOTA	379	CZ	ARG	43	5.734 -24.370	8.851	1.00	0.00
A	MOTA	380	NH1	ARG	43	4.729 -23.666	9.384	1.00	0.00
A	MOTA	381	NH2	ARG	43	6.942 -23.806	8.756	1.00	0.00
A	MOTA	382	C	ARG	43	1.420 -29.957	8.377	1.00	0.00
A	MOTA	-383	0	ARG	43	1.712 -30.980	7.761	1.00	0.00
	MOTA	384	N	THR	44	0.180 -29.695	8.801	1.00	0.00
	MOTA	385	CA	THR	44	-0.956 -30.575	8.558	1.00	0.00
	MOTA	386	CB	THR	44	-2.113 -30.204	9.502	1.00	0.00
	MOTA	387		THR	44	-1.708 -30.277	10.977	1.00	0.00
	MOTA	388	0G1	THR	44	-2.600 -28.908	9.195	1.00	0.00
	MOTA	389	С	THR	44	-1.421 -30.397	7.112	1.00	0.00
	ATOM	390	0	THR	44	-0.955 -29.492	6.424	1.00	0.00
	ATOM	391	N	SER	45	-2.365 -31.228	6.656	1.00	0.00
	ATOM	392	CA	SER	45	-2.938 -31.113	5.319	1.00	0.00
	ATOM	393	СВ	SER	45	-4.026 -32.171	5.144	1.00	0.00
	ATOM	394	OG	SER	45	-3.456 -33.456	5.270	1.00	0.00
	ATOM	395	С	SER	45	-3.498 -29.700	5.127	1.00	0.00
	MOTA	396	0	SER	45	-3.273 -29.076	4.091	1.00	0.00
	ATOM	397	N	VAL	46	-4.204 -29.191	6.149	1.00	0.00
	ATOM	398		VAL	46	-4.762 -27.848	6.139	1.00	0.00
	ATOM	399	CB	VAL	46	-5.582 -27.555	7.412	1.00	0.00
	ATOM	400		VAL	46	-6.316 -26.213	7.274	1.00	0.00
	ATOM	401		VAL	46	-6.633 -28.631	7.706	1.00	0.00
	ATOM	402	C	VAL	46	-3.624 -26.838	5.996	1.00	0.00
	ATOM	403	0	VAL	46	-3.730 -25.920	5.192	1.00	0.00
	ATOM	403	N	MET	47	-2.544 -27.002	6.773	1.00	0.00
	ATOM	405	CA	MET	47	-1.397 -26.100	6.744	1.00	0.00
	ATOM	405	CB	MET	47	-0.372 -26.509	7.810	1.00	
			CG			0.250 -25.277			0.00
	ATOM ATOM	407		MET	47 47		8.472	1.00	0.00
	ATOM	408	SD CE	MET	47 47	-0.814 -24.512	9.723	1.00	0.00
	ATOM	409		MET	47 47	-0.579 -25.679	11.090	1.00	0.00
	ATOM	410	C	MET	47 47	-0.746 -26.043	5.357	1.00	0.00
	ATOM	411	0 N	MET	47 40	-0.567 -24.961	4.803	1.00	0.00
	ATOM	412	N CA	LEU	48	-0.395 -27.211	4.803	1.00	0.00
	ATOM	413	CA	LEU	48	0.227 -27.370	3.493	1.00	0.00
	ATOM	414	CR	LEU	48	0.341 -28.872	3.159	1.00	0.00

ATOM 415 CG LEU 48 CD1 LEU ATOM 416 48 ATOM CD2 LEU 417 48 1.00 C -0.615 -26.641 ATOM 418 LEU 48 2.446 0.00419 0 LEU 48 -0.116 -25.782 1.713 1.00 ATOM 0.00 N LYS -1.903 - 26.989ATOM 420 49 2.404 1.00 0.00 **ATOM** 421 CA LYS 49 -2.859 - 26.4051.487 1.00 0.00 ATOM CBLYS -4.222 -27.070 422 49 1.703 1.00 0.00 CG LYS ATOM 423 49 -5.253 - 26.5940.668 1.00 0.00 CD LYS -6.535 -26.067 ATOM 424 49 1.317 1.00 0.00 ATOM 425 CE LYS -6.332 -24.814 1.00 49 2.178 0.00 ATOM 426 NZ LYS 49 -7.616 -24.261 2.642 1.00 0.00 ATOM 427 C LYS 49 -2.952 -24.889 1.657 1.00 0.00 0 ATOM 428 LYS 49 -2.887 -24.164 0.670 1.00 0.00 ASP ATOM 429 N 50 -3.124 -24.407 2.890 1.00 0.00 CA ASP -3.271 -22.990 ATOM 430 50 3.190 1.00 0.00 ASP ATOM CB -3.591 - 22.791431 50 4.673 1.00 0.00CG ASP 50 -3.889 -21.330 1.00 0.00 ATOM 432 4.977 ATOM OD1 ASP -3.254 -20.807 433 5.917 1.00 0.00 50 ATOM 434 OD2 ASP 50 -4.768 -20.7714.283 1.00 0.00 **ATOM** 435 C ASP -2.049 -22.182 50 2.761 1.00 0.00 0 ASP -2.198 -21.124 ATOM 436 50 2.152 1.00 0.00 ATOM 437 N ARG -0.843 -22.681 51 3.051 1.00 0.00 ATOM 438 CA ARG 0.385 - 22.00851 2.656 1.00 0.00 ARG ATOM 439 CB 51 1.606 -22.818 3.116 1.00 0.00 CG ARG ATOM 440 51 2.915 -22.017 3.205 1.00 0.00 CD ARG 3.175 -20.952 ATOM 441 51 2.139 1.00 0.00 ATOM 442 NE ARG 4.560 -20.457 2.226 1.00 51 0.00 ATOM 443 CZARG 4.966 -19.203 2.491 1.00 51 0.00 NH1 ARG ATOM 444 51 4.098 -18.261 2.870 1.00 0.00 ATOM 445 NH2 ARG 51 6.260 -18.882 2.376 1.00 0.00 ATOM 446 C ARG 0.366 - 21.8571.134 1.00 0.00 51 ATOM 447 0 ARG 51 0.499 - 20.7470.616 1.00 0.00 TRP ATOM 448 N 52 0.182 - 22.9780.422 1.00 0.00 -ATOM 449 CA TRP 52 0.132 - 22.982-1.0281.00 0.00 ATOM 450 CBTRP 52 -0.024 - 24.413-1.5441.00 0.00 ATOM CG TRP 451 52 0.127 - 24.541-3.0251.00 0.00 CD1 TRP **ATOM** 452 -0.888 - 24.705-3.89852 1.00 0.00 ATOM 453 NE1 TRP 52 -0.394 -24.791 -5.1831.00 0.00 ATOM CE2 TRP 0.981 - 24.678-5.200 454 52 1.00 0.00 CZ2 TRP ATOM 455 52 1.934 -24.698 -6.2301.00 0.00 ATOM 456 CH2 TRP 52 3.293 -24.558 -5.910 1.00 0.00 ATOM CZ3 TRP 52 3.682 -24.397 -4.569457 1.00 0.00 ATOM 458 CE3 TRP 2.717 -24.377 -3.5440.00 52 1.00 ATOM 459 CD2 TRP 52 1.343 -24.518 -3.8301.00 0.00 ATOM 460 C TRP 52 -0.994 -22.089-1.5551.00 0.00 0 TRP -2.608ATOM 461 52 -0.843 -21.4801.00 0.00 N ARG -2.117 -22.007 ATOM 462 53 -0.8371.00 0.00 ATOM 463 CA ARG 53 -3.267 -21.201 -1.2111.00 0.00

-4.444 -21.530 -0.285

1.00 0.00

403

ATOM

CB ARG

53

464

	405				(===)			400
	405	00		50	5 510 00 501	0.040		406
ATOM	465	CG	ARG	53	-5.718 -20.764		1.00	0.00
ATOM	466	CD	ARG	53	-6.883 -21.249	0.222	1.00	0.00
ATOM	467	NE	ARG	53	-6.691 -20.928		1.00	0.00
ATOM	468	CZ	ARG	53	-7.660 -20.983		1.00	0.00
ATOM	469		ARG	53	-7.411 -20.577	3.824	1.00	0.00
ATOM	470		ARG	53	-8.868 -21.477	2.272	1.00	0.00
ATOM	471	C	ARG	53	-2.900 -19.719	-1.187	1.00	0.00
ATOM	472	0	ARG	53	-3.042 -19.048	-2.206	1.00	0.00
ATOM	473	N	THR	54	-2.428 -19.205	-0.043	1.00	0.00
ATOM	474	CA	THR	54	-2.035 -17.807	0.093	1.00	0.00
ATOM	475	CB	THR	54	-1.512 -17.540	1.515	1.00	0.00
ATOM	476	CG2	THR	54	-1.264 -16.044	1.734	1.00	0.00
ATOM	477	0G1	THR	54	-2.448 -17.985	2.472	1.00	0.00
ATOM	478	С	THR	54	-0.969 -17.473	-0.952°	1.00	0.00
ATOM	479	0	THR	54	-1.107 -16.510	-1.709	1.00	0.00
ATOM	480	N	MET	55	0.088 -18.293	-0.985	1.00	0.00
ATOM	481	CA	MET	55	1.204 -18.154	-1.901	1.00	0.00
ATOM	482	CB	MET	55	2.166 -19.330	-1.677	1.00	0.00
ATOM	483	CG	MET	55	3.433 -19.258	-2.541	1.00	0.00
ATOM	484	SD	MET	55	3.905 -20.811	-3.352	1.00	0.00
ATOM	485	CE	MET	55	2.500 -21.014	-4.477	1.00	0.00
ATOM	486	C	MET	55	0.714 -18.080	-3.350	1.00	0.00
ATOM	487	0	MET	55	1.078 -17.158	-4.070	1.00	0.00
ATOM	488	N	LYS	56	-0.098 -19.045	-3.789	1.00	0.00
ATOM	489	CA	LYS	56	-0.612 -19.098	-5.149	1.00	0.00
ATOM	490	CB	LYS	56	-1.345 -20.426	-5.390	1.00	0.00
ATOM	491	CG	LYS	56	-1.838 -20.533	-6.839	1.00	0.00
ATOM	492	CD	LYS	56	-2.278 -21.951	-7.221	1.00	0.00
ATOM	493	CE	LYS	56	-3.395 -22.483	-6.317	1.00	0.00
ATOM	494	NZ	LYS	56	-3.971 -23.725	-6.862	1.00	0.00
ATOM	495	C	LYS	56	-1.485 -17.886	-5.466	1.00	0.00
ATOM	496	0	LYS	56	-1.296 -17.264	-6.508	1.00	0.00
ATOM	497	N	LYS	57	-2.437 -17.550	-4.589	1.00	0.00
ATOM	498	CA	LYS	57	-3.335 -16.421	-4.793	1.00	0.00
ATOM	499	CB	LYS	57	-4.306 -16.282	-3.609	1.00	0.00
ATOM	500	CG	LYS	57	-5.443 -17.314	-3.661	1.00	0.00
ATOM	501	CD	LYS	57	-6.398 -17.110	-2.476	1.00	0.00
ATOM	502	CE	LYS	57	-7.625 -18.025	-2.591	1.00	0.00
ATOM	503	NZ	LYS	57	-8.575 -17.824	-1.478	1.00	0.00
ATOM	504	C	LYS	57	-2.571 -15.113	-5.013	1.00	0.00
ATOM	505	0	LYS	57	-2.866 -14.388	-5.960	1.00	0.00
ATOM	506	N	LEU	58	-1.609 -14.800	-4.138	1.00	0.00
ATOM	507	CA	LEU	58	-0.849 -13.559	-4.224	1.00	0.00
ATOM	508	CB	LEU	58	-0.322 -13.201	-2.826	1.00	0.00
ATOM	509	CG	LEU	58	0.363 -11.821	-2.773	1.00	0.00
ATOM	510	CD1	LEU	58	0.059 -11.155	-1.429	1.00	0.00
ATOM	511	CD2	LEU	58	1.888 -11.925	-2.927	1.00	0.00
ATOM	512	C	LEU	58	0.278 -13.602	-5.258	1.00	0.00
ATOM	513	0	LEU	58	. 0.385 -12.708	-6.093	1.00	0.00
ATOM	514	N	LYS	59	1.144 -14.616	-5.181	1.00	0.00

ATOM 515 CA LYS **ATOM** 516 CB LYS **ATOM** 517 CG LYS **ATOM** 518 CD LYS ATOM 519 CE LYS ATOM 520 NZ LYS **ATOM** 521 C LYS 522 0 LYS ATOM 523 N LEU ATOM 524 CA LEU ATOM ATOM 525 CB LEU ATOM 526 CG LEU 527 CD1 LEU ATOM ATOM 528 CD2 LEU **ATOM** 529 C LEU **ATOM** 530 0 LEU ATOM 531 N ILE **ATOM** 532 CA ILE ATOM 533 CB ILE ATOM 534 CG2 ILE CG1 ILE ATOM 535 ATOM 536 CD1 ILE C ILE ATOM 537 538 0 ILE ATOM 61 1.680 -19.985 -11.266 1.00 0.00 ATOM 539 N SER 62 3.916 -20.124 -11.560 1.00 0.00 CA SER 62 ATOM 540 3.914 -20.691 -12.902 1.00 0.00 3.250 -22.078 -12.900 **ATOM** CB SER 62 541 1.00 0.00 ATOM 542 0G SER 62 3.533 -22.757 -14.106 0.00 1.00 ATOM 543 С SER 62 3.300 -19.743 -13.939 1.00 0.00 ATOM 544 0 SER 62 2.660 -20.199 -14.886 1.00 0.00 ATOM 545 N SER 63 3.506 -18.432 -13.768 1.00 0.00 **ATOM** CA SER 546 63 3.018 -17.406 -14.678 1.00 0.00 ATOM 547 CB SER 63 2.915 -16.088 -13.898 1.00 0.00 **ATOM** 548 00 SER 63 4.146 -15.800 -13.262 1.00 0.00 ATOM 549 С SER 3.970 -17.278 -15.872 63 1.00 0.00 **ATOM** 550 0 SER 4.985 -17.972 -15.941 63 1.00 0.00 ATOM 551 N ASP 64 3.647 -16.376 -16.807 1.00 0.00 CA ASP ATOM 552 64 4.429 -16.101 -18.006 1.00 0.00 ATOM 553 CBASP 64 3.552 -15.339 -19.014 1.00 0.00 **ATOM** CG ASP 554 2.265 -16.087 -19.338 1.00 0.00 64 OD1 ASP ATOM 555 64 2.248 -16.778 -20.380 1.00 0.00 OD2 ASP ATOM 556 1.321 -15.955 -18.527 1.00 0.00 64 ATOM C ASP 5.688 -15.304 -17.640 557 64 1.00 0.00 ATOM 558 0 ASP 64 5.829 -14.139 -18.007 1.00 0.00 ATOM N SER 559 65 6.601 -15.941 -16.901 1.00 0.00 ATOM 560 CA SER 7.850 -15.349 -16.448 1.00 65 0.00 ATOM 561 CB SER 65 8.328 -16.092 -15.192 1.00 0.00 0G SER ATOM 562 65 9.434 -15.431 -14.609 1.00 0.00 C ATOM 563 SER 8.918 -15.427 -17.538 65 1.00 0.00ATOM 564 0 SER 65 8.755 -16.119 -18.543 1.00 0.00

407

	400				(200)	440
1001	409	.,	01.11	00	10 000 11 707 17 001 1 00	410
ATOM	565	N	GLU	66		0.00
ATOM	566	CA	GLU	66		0.00
ATOM	567	CB	GLU	66		0.00
ATOM	568	CG	GLU	66		0.00
ATOM	569	CD	GLU	66	13.917 -11.973 -18.619 1.00	0.00
ATOM	570	0E1	GLU	66	13.408 -10.930 -19.085 1.00	0.00
ATOM	571	0E2	GLU	66	14.973 -12.036 -17.952 1.00	0.00
ATOM	572	C	GLU	66	11.949 -16.035 -17.956 1.00	0.00
ATOM	573	0	GLU	66	12.487 -16.613 -18.899 1.00	0.00
ATOM	574	N	ASP	67	11.958 -16.501 -16.700 1.00	0.00
ATOM	575	CA	ASP	67	12.568 -17.733 -16.229 1.00	0.00
ATOM	576	CB	ASP	67	14.005 -17.461 -15.767 1.00	0.00
ATOM	577	CG	ASP	67	14.679 -18.725 -15.241 1.00	0.00
ATOM	578	0D1	ASP	67	14.972 -19.605 -16.082 1.00	0.00
ATOM	579	OD2	ASP	67	14.914 -18.785 -14.015 1.00	0.00
ATOM	580	C	ASP	67	11.695 -18.246 -15.079 1.00	0.00
ATOM	581	0T1	ASP	67	11.089 -19.320 -15.289 1.00	0.00
ATOM	582		ASP	67	11.289 -17.368 -14.281 1.00	0.00
ATOM	583	05'	GUA	68	-6.791 -41.247 11.196 1.00	0.00
ATOM	584	C5'	GUA	68	-6.583 -41.870 9.946 1.00	0.00
ATOM	585	C4'	GUA	68	-6.944 -40.938 8.785 1.00	0.00
ATOM	586	04'	GUA	68	-8.269 -40.455 8.897 1.00	0.00
ATOM	587	C1'	GUA	68	-8.392 -39.377 7.995 1.00	0.00
ATOM	588	N9	GUA	68	-9.550 -38.518 8.310 1.00	0.00
ATOM	589	C8	GUA	68	-9.887 -37.964 9.515 1.00	0.00
ATOM	590	N7	GUA	68	-10.960 -37.224 9.482 1.00	0.00
ATOM	591	C5	GUA	68	-11.352 -37.269 8.147 1.00	0.00
ATOM	592	C6	GUA	68	-12.438 -36.623 7.480 1.00	0.00
ATOM	593	06	GUA	68	-13.328 -35.930 7.968 1.00	0.00
ATOM	594	N1	GUA	68	-12.416 -36.841 6.106 1.00	0.00
ATOM	595	C2	GUA	68	-11.482 -37.616 5.448 1.00	0.00
ATOM	596	N2	GUA	68	-11.566 -37.712 4.120 1.00	0.00
ATOM	597	N3	GUA	68	-10.485 -38.250 6.076 1.00	0.00
ATOM	598	C4	GUA	68	-10.472 -38.032 7.418 1.00	0.00
ATOM	599	C3'	GUA	68	-6.076 -39.674 8.693 1.00	0.00
ATOM	600	C2'		68	-7.094 -38.630 8.219 1.00	0.00
ATOM	601	03'	GUA	68	-5.014 -39.895 7.778 1.00	0.00
ATOM	602	P	THY	69	-3.933 -38.752 7.382 1.00	0.00
ATOM	603	0P1		69	-2.838 -39.404 6.632 1.00	0.00
ATOM	604		THY	69	-3.627 -37.966 8.598 1.00	0.00
ATOM	605	05'		69	-4.753 -37.809 6.359 1.00	0.00
ATOM	606	C5'		69	-5.405 -38.360 5.228 1.00	0.00
ATOM	607	C4'		69	-6.456 -37.406 4.643 1.00	0.00
ATOM	608	04'		69	-7.521 -37.023 5.482 1.00	0.00
ATOM	609	C1'		69	-8.046 -35.807 4.997 1.00	0.00
ATOM	610	N1	THY		-8.918 -35.178 6.022 1.00	0.00
ATOM	611	C6	THY		-8.548 -35.222 7.344 1.00	0.00
ATOM	612	C5	THY		-9.275 -34.591 8.297 1.00	0.00
ATOM	613	C7	THY		-8.743 -34.664 9.717 1.00	0.00
ATOM	614	C4	THY		-10.492 -33.873 7.969 1.00	0.00
AIUM	014	U4	ипи	บฮ	10.432 -33.013 1.303 1.00	0.00

	411								412
ATOM	615	04	THY	69	-11.207	-33.270	8.765	1.00	0.00
ATOM	616	N3	THY	69	-10.825	-33.914	6.625	1.00	0.00
ATOM	617	C2	THY	69	-10.084	-34.521	5.622	1.00	0.00
ATOM	618	02	THY	69	-10.461	-34.466	4.455	1.00	0.00
ATOM	619	C3'	THY	69	-5.865	-36.092	4.117	1.00	0.00
ATOM	620	C2'	THY	69	-6.744	-35.039	4.799	1.00	0.00
ATOM	621	03'	THY	69	-5.944	-36.021	2.704	1.00	0.00
ATOM	622	P	THY	70	-5.179	-34.856	1.891	1.00	0.00
ATOM	623	0P1	THY	- 70		-35.434	0.634	1.00	0.00
ATOM	624			70		-34.212	2.834	1.00	0.00
ATOM	625	05'	THY	70		-33.797	1.554	1.00	0.00
ATOM	626	C5'	THY			-34.104	0.647	1.00	0.00
ATOM	627	C4'	THY			-33.048	0.750	1.00	0.00
ATOM	628	04'	THY			-32.960	2.078	1.00	0.00
ATOM	629	C1'	THY	70		-31.707	2.239	1.00	0.00
ATOM	630	N1	THY	70 ·		-31.386	3.683	1.00	0.00
ATOM	631	C6	THY	70		-31.644	4.545	1.00	0.00
ATOM	632	C5	THY	70		-31.402	5.873	1.00	0.00
ATOM	633	C7	THY	70		-31.748	6.710	1.00	0.00
ATOM	634	C4	THY	70		-30.853		1.00	0.00
ATOM	635	04	THY	70		-30.560	7.623	1.00	0.00
ATOM	636	N3	THY	70	-11.023		5.517	1.00	0.00
ATOM	637	C2	THY	70		-30.856	4.148	1.00	0.00
ATOM	638	02	THY	70		-30.535	3.408	1.00	0.00
ATOM	639	C3'	THY	70		-31.624	0.400	1.00	0.00
ATOM	640	C2'	THY	70		-30.762	1.531	1.00	0.00
ATOM	641	03'	THY	70		-31.283	-0.884	1.00	0.00
ATOM	642	P	ADE	71		-29.927	-1.638	1.00	0.00
ATOM	643		ADE	71		-29.558	-1.201	1.00	0.00
ATOM	644		ADE	71			-3.079	1.00	0.00
ATOM	645	05'	ADE	71		-28.839	-1.013	1.00	0.00
ATOM	646	C5'	ADE	71		-28.710	-1.420	1.00	0.00
ATOM	647	C4'	ADE	71		-27.598	-0.587	1.00	0.00
ATOM	648	04'	ADE	71		-28.061	0.740	1.00	0.00
ATOM	649	C1'	ADE	71		-27.019	1.635	1.00	0.00
ATOM	650	N9	ADE	71		-27.416	3.044	1.00	0.00
ATOM	651	C8	ADE	71		-27.954	3.568	1.00	0.00
ATOM	652	N7	ADE	71		-27.973	4.867	1.00	0.00
ATOM	653	C5	ADE	71		-27.411	5.241	1.00	0.00
ATOM	654	C6	ADE	71		-27.110	6.497	1.00	0.00
ATOM	655	N6	ADE	71		-27.396	7.629	1.00	0.00
ATOM	656	N1	ADE	71		-26.499	6.552	1.00	0.00
ATOM	657	C2	ADE	71	-13.151	-26.212	5.409	1.00	0.00
ATOM	658	N3	ADE	71		-26.443	4.164	1.00	0.00
ATOM	659	C4	ADE	71		-27.061	4.144	1.00	0.00
ATOM	660	C3'	ADE	71		-26.389	-0.439	1.00	0.00
ATOM	661	C2'	ADE	71		-26.585	1.009	1.00	0.00
ATOM	662	03'	ADE	71	-10.815	-25.184	-0.618	1.00	0.00
ATOM	663	P	GUA	72	-10.116	-23.729	-0.677	1.00	0.00
ATOM	664	0P1	GUA	72	-9.798	-23.374	-2.075	1.00	0.00

```
413
                                                                    414
ATOM
        665
             OP2 GUA
                         72
                                 -9.081 -23.584
                                                   0.387
                                                          1.00 0.00
             05' GUA
                         72
                                -11.367 -22.869
                                                           1.00
                                                                0.00
ATOM
        666
                                                   -0.187
ATOM
             C5'
                 GUA
                         72
                                -12.666 -23.026
                                                   -0.728
        667
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        668
            C4'
                  GUA
                         72
                                -13.655 -22.421
                                                   0.268
                                                          1.00
                                                                 0.00
             04'
                  GUA
                         72
                                -13.589 -23.122
                                                   1.508
                                                          1.00
ATOM
        669
                                                                 0.00
            C1'
                  GUA
                         72
                                -13.220 -22.266
                                                   2.578 1.00 0.00
ATOM
        670
ATOM
             N9
                  GUA
                         72
                                 -12.267 -22.946
                                                   3.496
                                                          1.00
        671
                                                                 0.00
ATOM
        672
             68
                  GUA
                         72
                                -11.119 -23.616
                                                   3.163 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        673
             N7
                  GUA
                         72
                                 -10.388 -24.001
                                                    4.169
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        674
             C5
                  GUA
                         72
                                 -11.138 -23.608
                                                    5.273
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        675
             C6
                  GUA
                         72
                                 -10.886 -23.801
                                                    6.665
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        676
             06
                  GUA
                         72
                                  -9.908 -24.332
                                                   7.188
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        677 N1
                  GUA
                         72
                                 -11.914 -23.315
                                                    7.466
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        678
             C2
                  GUA
                         72
                                 -13.048 -22.692
                                                    6.984
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        679
             N2
                  GUA
                         72
                                 -13.933 -22.237
                                                    7.872
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        680
             N3
                  GUA
                         72
                                 -13.277 -22.488
                                                    5.678
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        681
              C4
                  GUA
                         72
                                 -12.297 -22.979
                                                    4.873
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         682
              C3'
                  GUA
                         72
                                 -13.270 -20.969
                                                    0.547
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C2'
                  GUA
                                 -12.529 -21.102
                                                           1.00
ATOM
         683
                         72
                                                    1.877
                                                                 0.00
                                                           1.00
              03'
                  GUA
                                 -14.437 -20.174
ATOM
         684
                         72
                                                    0.595
                                                                 0.00
         685
              P
                  GUA
                                 -14.369 -18.563
                                                    0.666
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         73
         686
              0P1
                  GUA
                         73
                                 -13.086 -18.113
                                                    0.074
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
         687
              OP2 GUA
                         73
                                 -15.649 -18.019
                                                    0.164
                                                           1.00
                                                                 0.00
              05'
                  GUA
ATOM
         688
                         73
                                 -14.306 -18.333
                                                    2.251
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C5'
                  GUA
ATOM
         689
                         73
                                 -15.395 -18.696
                                                    3.074
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         690
              C4'
                  GUA
                         73
                                 -14.994 -18.583
                                                    4.541
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  GUA
ATOM
         691
              04'
                         73
                                 -13.913 -19.453
                                                    4.830
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
                                                           1.00
         692
              C1'
                  GUA
                         73
                                 -13.105 -18.826
                                                    5.798
                                                                 0.00
              N9
                  GUA
                                                           1.00
ATOM
         693
                         73
                                 -11.776 -19.467
                                                    5.886
                                                                 0.00
              68
                  GUA
                                 -10.875 -19.725
                                                    4.887
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         694
                         73
ATOM
         695
              N7
                  GUA
                         73
                                  -9.810 -20.375
                                                    5.266
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  GUA
ATOM
         696
              С5
                         73
                                 -10.002 -20.533
                                                    6.636
                                                           1.00
                                                                  0.00
              60
                  GUA
                                  -9.170 -21.148
                                                    7.619
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         697
                         73
              06
                  GUA
                                  -8.077 -21.685
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         698
                         73
                                                    7.446
              N1
                  GUA
                                  -9.730 -21.100
ATOM
         699
                         73
                                                    8.892
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C2
                  GUA
                                 -10.951 -20.522
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         700
                         73
                                                    9.190
ATOM
         701
              N2
                  GUA
                         73
                                 -11.343 -20.478
                                                   10.463
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         702
              N3
                  GUA
                         73
                                 -11.726 -19.940
                                                    8.271
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  GUA
                                 -11.199 -19.977
ATOM
         703
              C4
                         73
                                                    7.021
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         704
              C3'
                  GUA
                         73
                                 -14.519 -17.171
                                                    4.928
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              C2'
                  GUA
                                 -13.038 -17.419
                                                    5.222
                                                           1.00
                                                                  0.00
         705
                          73
ATOM
         706
              03'
                  GUA
                          73
                                 -15.260 -16.764
                                                    6.065
                                                           1.00
                                                                  0.00
              P
                  GUA
ATOM
         707
                          74
                                 -15.067 -15.330
                                                    6.775
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         708
              OP1 GUA
                          74
                                 -14.025 -14.565
                                                    6.053
                                                           1.00
                                                                  0.00
              OP2 GUA
                                 -16.403 -14.734
                                                    6.990
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         709
                          74
              05'
                  GUA
ATOM
         710
                          74
                                 -14.470 -15.772
                                                    8.202
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C5'
                  GUA
                                 -15.246 -16.539
 ATOM
         711
                          74
                                                    9.104
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C4'
                  GUA
                          74
                                 -14.459 -16.838
                                                                  0.00
 ATOM
         712
                                                   10.382
                                                           1.00
              04'
                  GUA
 ATOM
         713
                                 -13.262 -17.530
                                                   10.063
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          74
 ATOM
              C1' GUA
                                 -12.146 -16.892
         714
                          74
                                                   10.652 1.00 0.00
```

```
415
                                                                   416
ATOM
             N9
                 GUA
        715
                         74
                                -10.967 -17.056
                                                   9.771 1.00 0.00
ATOM
        716
             С8
                 GUA
                         74
                                -10.865 -16.738
                                                   8.441
                                                          1.00 0.00
             N7
                 GUA
ATOM
        717
                         74
                                 -9.745 - 17.100
                                                   7.883
                                                         1.00
                                                                0.00
                 GUA
ATOM
        718
             C5
                         74
                                 -9.043 - 17.700
                                                   8.920 1.00
                                                                0.00
             60
                 GUA
ATOM
        719
                         74
                                 -7.768 -18.340
                                                   8.908
                                                         1.00
                                                                0.00
                 GUA
ATOM
        720
             06
                         74
                                 -7.024 -18.520
                                                   7.949
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        721
             N1
                 GUA
                         74
                                 -7.400 -18.819
                                                  10.158
                                                          1.00
                                                                0.00
        722
             C2
                 GUA
ATOM
                         74
                                 -8.187 -18.736
                                                  11.284
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N2
                 GUA
ATOM
        723
                         74
                                 -7.678 -19.208
                                                  12.423
                                                          1.00
                                                                0.00
             N3
                 GUA
ATOM
        724
                         74
                                 -9.398 -18.160
                                                  11.296
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        725
             C4
                 GUA
                                 -9.772 -17.663
                                                  10.085
                         74
                                                         1.00
                                                                 0.00
ATOM
        726
             C3'
                 GUA
                         74
                                -14.051 -15.564
                                                  11.133
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        727
             C2'
                 GUA
                         74
                                -12.581 -15.431
                                                  10.735
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        728
             03'
                 GUA
                         74
                                -14.256 -15.787
                                                  12.517
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        729
             P
                  THY
                                -13.895 -14.697
                                                  13.650
                         75
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        730
             OP1 THY
                         75
                                -13.555 -13.410
                                                  13.001
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        731
             OP2 THY
                         75
                                -14.940 -14.746
                                                  14.695
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        732
             05' THY
                         75
                                -12.546 -15.336
                                                  14.248
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C5'
ATOM
        733
                 THY
                         75
                                -12.563 -16.623
                                                  14.834
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        734
             C4'
                 THY
                         75
                                -11.150 -17.033
                                                  15.244
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        735
             04'
                 THY
                         75
                                -10.286 -16.962
                                                  14.124
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        736
             C1'
                 THY
                         75
                                 -9.056 -16.380
                                                  14.498
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N1
                 THY
ATOM
        737
                         75
                                 -8.425 -15.781
                                                  13.288
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        738
             C6
                 THY
                         75
                                 -9.147 -14.945
                                                  12.465
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        739
             C5
                 THY
                         75
                                                  11.248
                                 -8.674 -14.569
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C7
                 THY
ATOM
        740
                         75
                                 -9.534 -13.622
                                                  10.431
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 THY
ATOM
        741
              C4
                         75
                                 -7.407 -15.058
                                                  10.747
                                                          1.00
                                                                 0.00
             04
                 THY
                         75
ATOM
        742
                                 -6.942 -14.862
                                                   9.626
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 THY
ATOM
        743
              N3
                         75
                                  -6.710 -15.815
                                                  11.664
                                                          1.00
                                                                 0.00
              C2
                 THY
ATOM
        744
                         75
                                 -7.149 -16.203
                                                  12.919
                                                          1.00
                                                                 0.00
              02
                 THY
ATOM
        745
                         7Ś
                                 -6.424 -16.890
                                                  13.633
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        746
              C3'
                 THY
                                                  16.321
                         75
                                -10.551 -16.118
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        747
              C2'
                 THY
                                 -9.482 -15.347
                                                  15.540
                                                          1.00
                         75
                                                                 0.00
              03'
                 THY
ATOM
        748
                         75
                                -10.038 -16.959
                                                  17.341
                                                          1.00
                                                                 0.00
             P
                  THY
ATOM
        749
                         76
                                  -9.541 -16.405
                                                  18.770
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              OP1 THY
        750
                         76
                                  -9.535 -17.548
                                                  19.715
                                                          1.00
                                                                 0.00
              OP2 THY
                                 -10.293 -15.177
ATOM
        751
                         76
                                                  19.106
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        752
              05' THY
                         76
                                  -8.020 -16.008
                                                  18.443
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        753
              C5' THY
                         76
                                 -7.042 -17.012
                                                  18.297
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C4'
                 THY
ATOM
        754
                         76
                                  -5.787 - 16.484
                                                  17.612
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        755
              04'
                  THY
                         76
                                  -6.048 - 15.942
                                                  16.337
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C1'
                 THY
ATOM
        756
                                  -4.858 -15.292
                                                  15.956
                         76
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        757
              N1
                  THY
                         76
                                  -5.057 -14.439
                                                  14.752
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C6
                  THY
                                  -6.136 -13.588
ATOM
        758
                         76
                                                  14.678
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C5
                  THY
ATOM
        759
                         76
                                  -6.358 -12.835
                                                  13.572
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        760
              C7
                  THY
                                  -7.587 -11.945
                                                  13.614
                         76
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C4
                  THY
ATOM
        761
                         76
                                  -5.473 -12.887
                                                  12.426
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         762
              04
                  THY
                                  -5.591 -12.231
                                                  11.393
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         76
              N3
                  THY
ATOM
         763
                         76
                                  -4.436 -13.793
                                                  12.559
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         764
              C2
                 THY
                         76
                                  -4.182 -14.581
                                                 13.670 1.00 0.00
```

```
417
                                                                    418
ATOM
        765
             02 THY
                         76
                                  -3.228 -15.359 13.664 1.00 0.00
                 THY
                         76
ATOM
        766
             C3,
                                  -5.078 -15.359
                                                  18.371
                                                          1.00
ATOM
        767
             C2'
                 THY
                         76
                                  -4.552 -14.485
                                                  17.217
                                                           1.00
                                                                 0.00
                 THY
ATOM
        768
             03'
                         76
                                  -4.105 -15.970
                                                  19.204
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        769
             P
                  ADE
                         77
                                  -2.931 -15.158
                                                  19.951
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP1 ADE
ATOM
        770
                         77
                                  -2.396 -16.013
                                                  21.033
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OP2 ADE
ATOM
        771
                         77
                                  -3.403 -13.789
                                                   20.252
                                                           1.00
                                                                 0.00
             05'
ATOM
        772
                 ADE
                         77
                                  -1.826 -15.092
                                                  18.789
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C5'
                 ADE
ATOM
        773
                         77
                                  -1.381 - 16.279
                                                   18.165
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        774
             C4'
                 ADE
                         77
                                  -0.471 - 15.956
                                                  16.986
                                                           1.00
                                                                 0.00
        775
             04'
                 ADE
                                                   15.989
ATOM
                         77
                                  -1.141 -15.208
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C1'
                  ADE
                                  -0.204 -14.356
                                                  15.363
                                                           1.00
ATOM
        776
                         77
                                                                 0.00
        777
             N9
                  ADE
                         77
                                  -0.920 -13.269
                                                  14.659
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        778
             С8
                  ADE
                         77
                                  -1.999 -12.546 15.105
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
        779
             N7
                  ADE
                         77
                                  -2.536 -11.770
                                                  14.208
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C5
                  ADE
                                  -1.728 -11.960
                                                  13.095
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        780
                         77
             60
                  ADE
                                  -1.752 -11.416
                                                 11.799
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        781
                         77
             N6
                  ADE
                         77
                                  -2.696 -10.553
                                                  11.421
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        782
ATOM
             N1
                  ADE
                                  -0.773 -11.748
                                                  10.934
                                                           1.00
                                                                 0.00
        783
                         77
                  ADE
                                   0.172 - 12.595
ATOM
        784
             C2
                         77
                                                  11.337
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        785
             N3
                  ADE
                         77
                                   0.277 - 13.216
                                                  12.511
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  ADE
                         77
                                  -0.714 -12.842
                                                  13.365
                                                                 0.00
ATOM
        786
             C4
                                                          1.00
ATOM
        787
             C3' ADE
                         77
                                   0.765 - 15.140
                                                  17.376
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C2'
ATOM
        788
                 ADE
                         77
                                   0.583 - 13.851
                                                   16.568
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        789
              03'
                  ADE
                         77
                                   1.878 -15.911
                                                   16.971
                                                           1.00
                                                                 0.00
             P
ATOM
        790
                  GUA
                         78
                                   3.358 -15.653
                                                  17.529
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        791
             OP1 GUA
                         78
                                   4.181 -16.859
                                                  17.249
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        792
              OP2 GUA
                         78
                                   3.249 -15.137
                                                   18.908
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        793
              05' GUA
                          78
                                   3.847 -14.453
                                                   16.602
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         794
              C5' GUA
                          78
                                   4.263 -14.659
                                                   15.273
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         795
              C4'
                  GUA
                          78
                                   4.378 -13.312
                                                   14.561
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  GUA
                                   3.113 -12.764
                                                   14.268
ATOM
         796
              04'
                          78
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         797
              C1'
                  GUA
                          78
                                   3.368 -11.456
                                                   13.811
                                                           1.00
                                                                 0.00
              N9
                  GUA
                                   2.146 -10.630
                                                   13.781
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         798
                          78
                  GUA
ATOM
         799
              63
                          78
                                   1.274 -10.346
                                                   14.801
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              N7
                  GUA
                                          -9.586
                                                   14.450
                                                           1.00
                                                                 0.00
         800
                          78
                                   0.274
              C5
                  GUA
                                          -9.338
                                                   13.099
ATOM
         801
                          78
                                   0.500
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              C6
                  GUA
                                  -0.252
                                          -8.571
                                                   12.156
         802
                          78
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         803
              06
                  GUA
                          78
                                  -1.276
                                          -7.918
                                                   12.350
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         804
              N1
                  GUA
                          78
                                   0.298
                                          -8.609
                                                   10.878
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         805
              C2
                  GUA
                          78
                                   1.454
                                          -9.286
                                                   10.547
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         806
              N2
                  GUA
                          78
                                   1.871
                                          -9.235
                                                    9.283
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         807
              N3
                  GUA
                          78
                                   2.175
                                          -9.985
                                                   11.434
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         808
              C4
                  GUA
                          78
                                   1.644 - 9.975
                                                   12.684
                                                           1.00
                                                                  0.00
         809
              C3'
                  GUA
                                   5.039 -12.205
                                                   15.391
ATOM
                          78
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C2'
                  GUA
ATOM
         810
                          78
                                   4.387 -10.939
                                                   14.822
                                                           1.00
                                                                  0.00
              03'
                  GUA
 ATOM
         811
                          78
                                   6.442 - 12.277
                                                   15.236
                                                           1.00
                                                                  0.00
              P
                  GUA
                                   7.434 -11.142
                                                                  0.00
 ATOM
         812
                          79
                                                   15.797
                                                           1.00
 ATOM
              OP1 GUA
                                   6.736 - 10.424
                                                   16.885
                                                           1.00
                                                                  0.00
         813
                          79
 ATOM
              OP2 GUA
                                   8.726 -11.799 16.104 1.00
         814
                          79
                                                                 0.00
```

```
419
                                                                    420
        815
            05' GUA
ATOM
                         79
                                  7.585 -10.153 14.527 1.00 0.00
ATOM
        816
             C5'
                 GUA
                         79
                                  7.956 -10.639 13.247
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        817
             C4'
                 GUA
                         79
                                  7.540
                                         -9.665 12.134
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        818
             04'
                 GUA
                         79
                                  6.149
                                         -9.381
                                                  12.212 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        819
             C1'
                  GUA
                         79
                                  5.926
                                          -8.003
                                                  11.989
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        820
             N9
                  GUA
                         79
                                   4.664
                                          -7.558 12.633
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        821
             С8
                  GUA
                         79
                                   4.306
                                         -7.670
                                                  13.953
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        822
             N7
                  GUA
                                  3.136
                                         -7.178
                                                  14.242
                         79
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        823
             C5
                  GUA
                                   2.680
                                          -6.682
                                                  13.028
                         79
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        824
             C6
                  GUA
                         79
                                   1.466
                                          -5.999
                                                  12.722
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        825
             06
                  GUA
                                   0.547
                                          -5.705
                         79
                                                  13.483
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        826
             N1
                  GUA
                                   1.366
                                          -5.664
                         79
                                                  11.377
                                                           1.00
                                                                 0.00
        827
             C2
                  GUA
                                   2.325
                                         -5.953
ATOM
                         79
                                                  10.431
                                                           1.00
                                                                 0.00
             N2
                                   2.078 -5.565
ATOM
        828
                  GUA
                         79
                                                   9.177
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N3
ATOM
        829
                  GUA
                         79
                                   3.475 -6.583
                                                  10.716
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        830
             C4
                  GUA
                                   3.598
                                         -6.920
                         79
                                                   12.031
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        831
             C3,
                  GUA
                                   8.262
                                         -8.311
                         79
                                                  12.187
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        832
             C2'
                  GUA
                         79
                                   7.146
                                         -7.384
                                                  12.667
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        833
             03'
                  GUA
                                   8.722 -8.001
                                                   10.881
                         79
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        834
             P
                  GUA
                                   9.556
                                          -6.662
                         80
                                                   10.541
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        835
             OP1 GUA
                                  10.090
                                          -6.099
                                                   11.801
                         80
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP2 GUA
ATOM
        836
                                  10.475
                                          -6.963
                         80
                                                    9.421
                                                           1.00
                                                                 0.00
              05' GUA
ATOM
        837
                         80
                                   8.410
                                          -5.672
                                                    9.994
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C5'
ATOM
        838
                  GUA
                                   7.797
                                         -5.898
                                                    8.738
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         80
ATOM
        839
              C4'
                  GUA
                         80
                                   6.754
                                          -4.817
                                                    8.446
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        840
              04'
                 GUA
                         80
                                   5.745
                                          -4.846
                                                    9.438
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                                                 0.00
ATOM
        841
              C1'
                 GUA
                         80
                                   5.385
                                          -3.521
                                                    9.754
                                                           1.00
ATOM
        842
              N9
                  GUA
                         80
                                   4.706
                                          -3.459
                                                   11.065
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C8
                  GUA
                                          -3.930
ATOM
        843
                         80
                                   5.139
                                                   12.279
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              N7
                  GUA
                                   4.277
                                          -3.785
                                                   13.246
        844
                         80
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         845
              C5
                  GUA
                         80
                                   3.192
                                          -3.167
                                                   12.634
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C6
                  GUA
                                          -2.778
ATOM
        846
                                   1.929
                                                   13.173
                                                           1.00
                         80
                                                                 0.00
ATOM
              06
                  GUA
                                         -2.927
        847
                         80
                                   1.510
                                                   14.320
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         848
              N1
                  GUA
                                          -2.170
                                                  12.223
                          80
                                   1.118
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C2
                  GUA
                                          -1.963
ATOM
        849
                          80
                                   1.464
                                                   10.905
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         850
              N2
                  GUA
                                   0.589
                                          -1.318
                          80
                                                   10.129
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        851
              N3
                  GUA
                                   2.637
                                         -2.352
                                                   10.389
                                                           1.00
                         80
                                                                 0.00
ATOM
        852
              C4
                  GUA
                                   3.453
                                          -2.947
                                                   11.302
                                                           1.00
                          80
                                                                 0.00
              C3'
                  GUA
                                   7.340 -3.395
ATOM
         853
                         80
                                                    8.484
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         854
              C2'
                 GUA
                          80
                                   6.743
                                          -2.826
                                                    9.767
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              03'
                  GUA
                                   6.887
                                          -2.645
         855
                         80
                                                    7.375
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         856
              05'
                  CYT
                          81
                                  -7.071
                                           2.287
                                                   14.237
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         857
              C5*
                  CYT
                                  -6.467
                                           3.159
                                                   13.306
                                                          1.00
                          81
                                                                 0.00
ATOM
         858
              C4'
                  CYT
                          81
                                  -5.402
                                           2.419
                                                   12.493
                                                           1.00
                                                                 0.00
         859
              04'
                  CYT
                                  -4.468
                                           1.782
ATOM
                          81
                                                   13.341
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C1'
                  CYT
ATOM
         860
                          81
                                  -3.812
                                           0.812
                                                   12.555
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              N1
                  CYT
                                  -3.105
                                          -0.189
                                                   13.384
         861
                          81
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         862
              С6
                  CYT
                                  -3.724
                                          -0.731
                                                                 0.00
                          81
                                                   14.481
                                                           1.00
ATOM
         863
              C5
                  CYT
                          81
                                  -3.169
                                          -1.745
                                                   15.179
                                                                 0.00
                                                           1.00
ATOM
              C4 CYT
                                  -1.885 -2.212 14.735 1.00
         864
                          81
                                                                 0.00
```

	404				(LIL)				100
	421								422
ATOM	865	N4	CYT	81	-1.240	-3:180	15.389	1.00	0.00
ATOM	866	N3	CYT	81	-1.307	-1.703	13.642	1.00	0.00
ATOM	867	C2	CYT	81	-1.896	-0.706	12.928	1.00	0.00
ATOM	868	02	CYT	81	-1.360	-0.295	11.901	1.00	0.00
ATOM	869	C3,	CYT	81	-5.962	1.286	11.618	1.00	0.00
ATOM	870	C2'	CYT	81	-4.980	0.140	11.849	1.00	0.00
ATOM	871	03'	CYT	81	-6.009	1.719	10.268	1.00	0.00
ATOM	872	P	CYT	82	-6.569	0.784	9.076	1.00	0.00
ATOM	873	0P1	CYT	82	-7.424	-0.264	9.677	1.00	0.00
ATOM	874	0P2	CYT	82	-7.117	1.667	8.023	1.00	0.00
ATOM	875	05'	CYT	82	-5.238	0.069	8.500	1.00	0.00
ATOM	876	C5'	CYT	82	-4.268	0.788	7.757	1.00	0.00
ATOM	877	C4'	CYT	82	-3.205	-0.162	7.187	1.00	0.00
ATOM	878	04'	CYT	82	-2.495	-0.797	8.233	1.00	0.00
ATOM	879	C1'	CYT	82	-2.251	-2.155	7.916	1.00	0.00
ATOM	880	N1	CYT	82	-2.216	-2.918	9.189	1.00	0.00
ATOM	881	C6	CYT	82	-3.223	-2.719	10.095	1.00	0.00
ATOM	882	C5	CYT	82	-3.245	-3.338	11.290	1.00	0.00
ATOM	883	C4	CYT	82	-2.152	-4.222	11.578	1.00	0.00
ATOM	884	N4	CYT	82	-2.124	-4.898	12.726	1.00	0.00
ATOM	885	N3	CYT	82	-1.168	-4.426	10.687	1.00	0.00
ATOM	886	C2	CYT	82	-1.171	-3.800	9.473	1.00	0.00
ATOM	887	02	CYT	82	-0.272	-4.025	8.665	1.00	0.00
ATOM	888	C3'	CYT	82	-3.818	-1.279	6.330	1.00	0.00
ATOM	889	C2'	CYT	82	-3.483	-2.550	7.102	1.00	0.00
ATOM	890	03'	CYT	82	-3.250	-1.235	5.030	1.00	0.00
ATOM	891	P	CYT	83	-3.817	-2.119	3.800	1.00	0.00
ATOM	892		CYT	83	-3.574	-1.373	2.546	1.00	0.00
ATOM	893		CYT	83	-5.186	-2.571	4.134	1.00	0.00
	894	05'	CYT	83	-2.854	-3.407	3.813	1.00	0.00
ATOM ATOM	895	C5'	CYT	83	-1.524	-3.339	3.328	1.00	0.00
ATOM	896	C4'	CYT	83	-0.785	-4.630	3.689	1.00	0.00
ATOM	897	04'	CYT	83	-0.765	-4.843	5.077	1.00	0.00
		C1'	CYT	83	-0.732	-6.212	5.352	1.00	0.00
ATOM	898		CYT	83	-1.424	-6.527	6.629	1.00	0.00
ATOM	899 900	N1 C6	CYT		-2.678	-6.025	6.863	1.00	0.00
ATOM	901	C5	CYT	83 83	-3.289	-6.160	8.060	1.00	0.00
ATOM							9.072	1.00	0.00
ATOM	902	C4	CYT	83	-2.574	-6.884 -7.063		1.00	0.00
ATOM	903	N4	CYT	83	-3.119	-7.062 -7.405	10.276 8.831		0.00
ATOM	904	N3	CYT	83	-1.360			1.00	
ATOM	905	C2	CYT	83	-0.759	-7.248	7.616	1.00	0.00 $0.00$
ATOM	906	02	CYT	83	0.344	-7.747 5.00c	7.403	1.00	0.00
ATOM	907	C3'		83	-1.368	-5.886	3.025	1.00	
ATOM	908	C2'		83	-1.396	-6.910	4.167	1.00	0.00
ATOM	909	03'		83	-0.542	-6.269	1.935	1.00	0.00
ATOM	910	P	THY	84	-0.869	-7.543	0.991	1.00	0.00
ATOM	911		THY	84	-0.186	-7.345	-0.306	1.00	0.00
ATOM	912		THY 2	84	-2.326	-7.801	1.026	1.00	0.00
ATOM	913			84	-0.128	-8.749	1.760	1.00	0.00
ATOM	914	C5'	THY	84	1.280	-8.771	1.895	1.00	0.00

423 424 **ATOM** 915 C4' THY 84 1.690 - 9.8652.882 1.00 0.00 ATOM 916 04' THY 84 1.036 - 9.6664.121 1.00 0.00 ATOM 917 C1' THY 0.851 - 10.9144.750 1.00 0.00 84 918 N1 THY -0.215 - 10.7935.787 1.00 0.00 ATOM 84 919 C6 THY 84 -1.437 -10.259 5.450 1.00 0.00 ATOM ATOM 920 С5 THY 84 -2.412 -10.088 6.375 1.00 0.00 THY ATOM 921 **C7** 84 -3.731 -9.5075.897 1.00 0.00 THY ATOM 922 C4 84 -2.210 -10.450 7.760 1.00 0.00 THY ATOM 923 04 84 -3.044 - 10.3158.649 1.00 0.00 THY ATOM 924 N3 84 -0.957 -10.979 8.036 1.00 0.00 C2THY ATOM 925 84 0.060 - 11.1697.108 1.00 0.00 02 THY ATOM 926 84 1.133 -11.647 7.463 1.00 0.00927 C3' THY 1.307 -11.278 1.00 0.00 ATOM 84 2.410 C2' THY 928 0.430 - 11.7871.00 0.00 ATOM 84 3.564 ATOM 929 03' THY 2.504 -12.007 1.00 0.00 84 2.172 930 P ADE ATOM 85 2.527 - 13.5481.680 1.00 0.00 OP1 ADE 1.340 -13.808 ATOM 931 85 0.836 1.00 0.00 OP2 ADE ATOM 932 85 3.876 -13.862 1.156 1.00 0.00 05' ADE ATOM 933 2.338 -14.316 1.00 85 3.079 0.00 C5' ADE 3.236 -14.100 0.00 ATOM 934 85 4.151 1.00 C4' ADE **ATOM** 935 2.700 - 14.7425.430 1.00 0.00 85 ATOM 936 04' ADE 85 1.508 -14.145 5.899 1.00 0.00 C1' ADE ATOM 937 0.813 - 15.1221.00 0.00 85 6.646 N9 ADE ATOM 938 85 -0.576 -14.679 6.887 1.00 0.00 5.986 **ATOM** 939 68 ADE 85 -1.452 -14.129 1.00 0.00 N7 ADE -2.555 -13.677 ATOM 940 85 6.515 1.00 0.00 ATOM 941 C5 ADE -2.412 -13.976 7.865 1.00 85 0.00 **ATOM** 942 63 ADE 85 -3.230 -13.749 8.990 1.00 0.00 ATOM 943 N6 ADE 85 -4.407 -13.123 8.905 1.00 0.00 N1 ADE -2.819 -14.202 ATOM 944 85 10.189 1.00 0.00 ATOM 945 C2ADE 85 -1.656 -14.839 10.268 1.00 0.00 ATOM 946 N3 ADE 85 -0.782 -15.091 9.299 1.00 0.00 ATOM 947 C4 ADE 85 -1.224 - 14.6238.100 1.00 0.00 ADE ATOM 948 C3' 85 2.367 -16.225 5.259 1.00 0.00 ATOM 949 C2' ADE 85 0.898 - 16.2935.679 1.00 0.00 03' ADE ATOM 950 85 3.238 -16.927 6.121 1.00 0.00 ATOM 951 P ADE 86 3.385 -18.521 6.100 1.00 0.00 OP1 ADE 2.627 - 19.050ATOM 952 86 4.941 1.00 0.00OP2 ADE ATOM 953 86 4.826 -18.827 6.242 1.00 0.00 ATOM 05' ADE 2.629 -18.948 7.451 1.00 0.00 954 86 C5' ADE ATOM 955 86 3.210 -18.669 8.708 1.00 0.00 ATOM C4' ADE 2.310 -19.107 9.860 1.00 956 86 0.00 04' ADE ATOM 957 86 1.072 -18.426 9.819 1.00 0.00 ATOM 958 C1' ADE 86 0.014 - 19.3579.824 1.00 0.00 N9 ADE -1.123 -18.752 9.096 1.00 0.00 ATOM 959 86 68 ADE -1.256 - 18.5367.750 1.00 0.00 ATOM 960 86 ATOM 961 N7 ADE 86 -2.320 -17.861 7.411 1.00 0.00 ATOM 962 C5 ADE 86 -2.954 -17.626 8.625 1.00 0.00 ADE 0.00 ATOM 963 60 86 -4.148 -16.964 8.984 1.00 -4.954 -16.360 ATOM 964 N6 ADE 86 8.109 1.00 0.00

```
425
                                                                   426
ATOM
        965
            N1
                 ADE
                         86
                                 -4.472 -16.896
                                                  10.284 1.00 0.00
ATOM
        966
             C2
                 ADE
                         86
                                 -3.662 -17.430
                                                  11.187
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             N3
                 ADE
                         86
                                 -2.503 -18.046
                                                  10.989
                                                          1.00
                                                                 0.00
        967
ATOM
        968
             C4
                 ADE
                                 -2.212 -18.136
                                                   9.662
                                                         1.00
                                                                 0.00
                         86
        969
             C3'
                 ADE
                                  1.996 -20.606
                                                   9.817
                                                          1.00
ATOM
                         86
                                                                 0.00
             C2' ADE
                                  0.619 -20.597
ATOM
        970
                         86
                                                   9.161
                                                          1.00
                                                                 0.00
             03'
                 ADE
                                  1.947 -21.077
                                                  11.150
ATOM
        971
                         86
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        972 P
                 CYT
                                  2.226 -22.617
                                                  11.539
                         87
                                                          1.00
                                                                 0.00
        973
             OP1 CYT
                                  3.411 -22.631
                                                  12.430
ATOM
                         87
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        974
             OP2 CYT
                                  2.235 -23.441
                                                  10.304
                         87
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        975
             05' CYT
                                  0.903 -22.963
                                                  12.403
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         87
             C5' CYT
ATOM
        976
                         87
                                  0.815 - 22.583
                                                  13.766
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        977
             C4'
                 CYT
                         87
                                 -0.551 -21.990
                                                  14.148
                                                          1.00
                                                                 0.00
             04'
                 CYT
ATOM
        978
                         87
                                 -1.132 -21.227
                                                  13.098
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C1' CYT
                                 -2.540 -21.388
ATOM
        979
                         87
                                                  13.123
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             N1
                 CYT
                                 -3.148 -21.132
                                                  11.787
                                                          1.00
                                                                 0.00
        980
                         87
ATOM
        981
             63
                 CYT
                         87
                                 -2.511 -21.562
                                                  10.653
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        982
             C5
                 CYT
                         87
                                 -3.033 - 21.369
                                                   9.420
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        983
             C4
                 CYT
                         87
                                  -4.290 -20.687
                                                   9.350
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             N4
                  CYT
                                  -4.810 -20.374
                                                   8.164
                                                           1.00
                                                                 0.00
        984
                         87
             N3
                 CYT
                                  -4.924 -20.281
                                                  10.458
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        985
                         87
              C2
                 CYT
                                  -4.383 -20.487
                                                  11.694
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        986
                         87
ATOM
        987
              02 CYT
                         87
                                  -4.976 -20.081
                                                  12.690
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C3' CYT
                         87
                                  -1.606 -23.017
                                                  14.575
                                                           1.00
                                                                 0.00
        988
ATOM
        989
              C2'
                 CYT
                         87
                                  -2.661 -22.863
                                                  13.486
                                                           1.00
                                                                 0.00
              03' CYT
ATOM
        990
                         87
                                  -2.083 -22.623
                                                  15.853
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        991
             P
                  CYT
                         88
                                  -3.072 -23.534
                                                  16.742
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        992
              OP1 CYT
                         88
                                  -2.887 -24.947
                                                  16.350
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OP2 CYT
                                                                 0.00
ATOM
        993
                         88
                                  -2.895 -23.140
                                                  18.158
                                                           1.00
              05' CYT
                                  -4.536 -23.065
                                                  16.267
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        994
                         88
              C5' CYT
                                  -5.085 -21.827
                                                                 0.00
ATOM
         995
                         88
                                                  16.678
                                                           1.00
ATOM
              C4' CYT
                                  -6.461 -21.623
                                                  16.040
                                                           1.00
                                                                 0.00
         996
                         88
              04'
                  CYT
                                                                 0.00
ATOM
                         88
                                  -6.355 -21.615
                                                  14.638
                                                           1.00
         997
ATOM
         998
              C1' CYT
                          88
                                  -7.570 -22.058
                                                  14.078
                                                           1.00
                                                                 0.00
              N1
                  CYT
                          88
                                  -7.286 -22.560
                                                  12.716
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         999
ATOM
        1000
              63
                  CYT
                          88
                                  -6.181 -23.338
                                                  12.506
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1001
              С5
                  CYT
                          88
                                  -5.767 -23.661 11.265
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1002
              C4
                  CYT
                          88
                                  -6.547 -23.148
                                                  10.172
                                                           1.00
                                                                 0.00
              N4
                  CYT
                                  -6.158 -23.328
                                                   8.910
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1003
                          88
ATOM
        1004
              N3 CYT
                          88
                                  -7.687 -22.477
                                                  10.391
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1005
              C2
                  CYT
                                  -8.104 -22.196
                                                  11.655
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          88
ATOM
        1006
              02
                  CYT
                          88
                                  -9.185 -21.647
                                                  11.839
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1007
              C3' CYT
                          88
                                  -7.468 -22.739
                                                  16.356
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1008
              C2' CYT
                          88
                                  -7.961 -23.210 14.989
                                                           1.00
                                                                 0.00
              03' CYT
                                  -8.472 -22.160
                                                                 0.00
ATOM
        1009
                          88
                                                  17.175
                                                           1.00
ATOM
        1010
              P
                  CYT
                          89
                                  -9.733 -22.978
                                                  17.744
                                                           1.00
                                                                 0.00
        1011
              OP1 CYT
                                 -10.189 -22.285
                                                  18.972
 ATOM
                          89
                                                           1.00
                                                                 0.00
        1012
              OP2 CYT
                          89
                                  -9.375 -24.411
                                                  17.801
                                                                 0.00
 ATOM
                                                           1.00
              05' CYT
                                 -10.851 -22.767
ATOM
        1013
                          89
                                                  16.605
                                                           1.00
                                                                 0.00
        1014 C5' CYT
                                 -11.496 -21.517 16.427 1.00 0.00
 ATOM
                          89
```

```
427
                                                                    428
       1015 C4' CYT
ATOM
                         89
                                 -12.500 -21.596 15.272 1.00 0.00
ATOM
       1016 04' CYT
                         89
                                 -11.831 -21.952
                                                  14.081
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1017
             C1' CYT
                         89
                                 -12.702 -22.685
                                                   13.247
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  CYT
ATOM
       1018 N1
                         89
                                 -11.872 -23.529
                                                   12.352
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1019
             63
                  CYT
                         89
                                 -10.831 -24.241
                                                   12.888
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  CYT
ATOM
       1020
             C5
                         89
                                  -9.923 -24.870
                                                   12.116
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  CYT
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1021
             C4
                         89
                                 -10.103 - 24.767
                                                   10.694
             N4
                  CYT
ATOM
       1022
                         89
                                  -9.235 -25.337
                                                    9.855
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  CYT
ATOM
       1023
             N3
                         89
                                 -11.150 -24.111
                                                   10.171
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1024
             C2
                  CYT
                         89
                                 -12.063 -23.492
                                                   10.974
                                                           1.00
                                                                 0.00
             02
                  CYT
ATOM
       1025
                         89
                                 -13.033 -22.929
                                                   10.471
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1026
             C3'
                  CYT
                         89
                                 -13.580 -22.668
                                                   15.492
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C2'
ATOM
       1027
                 CYT
                         89
                                 -13.479 -23.543
                                                   14.242
                                                           1.00
                                                                 0.00
             03' CYT
ATOM
       1028
                         89
                                 -14.842 -22.037
                                                   15.649
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
       1029
             P
                         90
                                 -16.205 -22.861
                                                   15.937
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP1 THY
ATOM
       1030
                                 -17.177 -21.942
                                                   16.568
                                                           1.00
                                                                 0.00
       1031
             OP2 THY
ATOM
                         90
                                 -15.853 -24.133
                                                   16.608
                                                           1.00
                                                                 0.00
             05' THY
ATOM
       1032
                         90
                                 -16.728 -23.204
                                                   14.452
                                                           1.00
                                                                  0.00
             C5'
                  THY
ATOM
       1033
                                 -17.146 - 22.183
                         90
                                                   13.566
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
             C4'
                  THY
                                                   12.153
       1034
                         90
                                 -17.319 - 22.750
                                                           1.00
                                                                  0.00
       1035
             04'
                  THY
ATOM
                         90
                                 -16.108 -23.325
                                                   11.707
                                                           1.00
                                                                  0.00
             C1'
                  THY
ATOM
       1036
                         90
                                 -16.412 -24.332
                                                   10.769
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
       1037
              N1
                  THY
                         90
                                 -15.234 -25.225
                                                   10.611
                                                           1.00
                                                                  0.00
              6
                  THY
ATOM
       1038
                         90
                                 -14.663 -25.800
                                                   11.722
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
       1039
              C5
                  THY
                         90
                                 -13.551 -26.564
                                                   11.627
                                                                  0.00
                                                           1.00
                  THY
       1040
              C7
                         90
ATOM
                                 -13.025 -27.168
                                                   12.916
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
       1041
              C4
                  THY
                                 -12.905 -26.799
                         90
                                                   10.353
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
       1042
              04
                  THY
                         90
                                 -11.895 -27.475
                                                   10.190
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
       1043
              N3
                  THY
                                 -13.524 -26.176
                         90
                                                    9.280
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
       1044
              C2
                  THY
                                 -14.685 -25.419
                         90
                                                    9.342
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
       1045
              02
                  THY
                                 -15.186 -24.973
                          90
                                                    8.314
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C3'
ATOM
        1046
                  THY
                                 -18.374 -23.866
                                                   12.058
                                                           1.00
                                                                  0.00
                         90
ATOM
        1047
              C2'
                  THY
                          90
                                 -17.593 -25.033
                                                   11.440
                                                           1.00
                                                                  0.00
              03'
                  THY
ATOM
        1048
                         90
                                 -19.446 -23.411
                                                   11.249
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1049
             P
                  ADE
                                 -20.798 -24.268
                          91
                                                   11.031
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1050
              OP1 ADE
                                 -21.015 -25.122
                                                                  0.00
                          91
                                                   12.219
                                                           1.00
ATOM
        1051
              OP2 ADE
                                 -21.863 -23.345
                                                   10.581
                                                           1.00
                          91
                                                                  0.00
              05' ADE
ATOM
        1052
                          91
                                 -20.405 - 25.217
                                                    9.793
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1053
              C5'
                  ADE
                          91
                                 -20.269 -24.690
                                                    8.488
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1054
              C4'
                  ADE
                                 -19.633 -25.726
                          91
                                                    7.558
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1055
              04'
                  ADE
                          91
                                 -18.328 - 26.065
                                                    7.972
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1056
              C1'
                  ADE
                          91
                                 -17.994 -27.260
                                                    7.305
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1057
              N9
                  ADE
                          91
                                 -16.833 -27.899
                                                    7.947
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1058
              С8
                  ADE
                                 -16.631 -28.118
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          91
                                                    9.285
ATOM
        1059
              N7
                  ADE
                                 -15.497 -28.703
                          91
                                                    9.566
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1060
              C5
                  ADE
                                 -14.919 - 28.900
                                                    8.314
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          91
ATOM
        1061
              60
                  ADE
                                 -13.704 -29.479
                          91
                                                    7.892
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1062
              N6
                  ADE
                          91
                                 -12.796 - 29.961
                                                    8.745
                                                           1.00
                                                                  0.00
        1063
              N1
                  ADE
ATOM
                          91
                                 -13.453 -29.557
                                                    6.572
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1064
              C2
                  ADE
                          91
                                 -14.347 -29.076
                                                    5.713 1.00 0.00
```

```
429
                                                                   430
ATOM
       1065 N3
                 ADE
                                                  5.979 1.00 0.00
                        91
                                -15.507 -28.489
       1066
             C4
                 ADE
                         91
                                -15.738 -28.431
                                                  7.318 1.00
                                                                0.00
ATOM
ATOM
       1067 C3'
                 ADE
                                -20.381 -27.067
                                                   7.496
                                                         1.00
                                                                0.00
                         91
ATOM
       1068 C2'
                 ADE
                         91
                                -19.246 -28.099
                                                  7.518 1.00
                                                                0.00
       1069 03'
ATOM
                 ADE
                         91
                                -21.171 -27.072
                                                   6.317 1.00
                                                                0.00
ATOM
       1070 P
                 ADE
                         92
                                -21.990 -28.364
                                                   5.802 1.00
                                                                0.00
       1071 OP1 ADE
                                -23.089 -27.893
ATOM
                         92
                                                   4.932 1.00
                                                                0.00
ATOM
       1072 OP2 ADE
                         92
                                -22.284 -29.238
                                                   6.959
                                                         1.00
                                                                0.00
       1073 05'
                 ADE
ATOM
                         92
                                -20.898 -29.100
                                                   4.873
                                                         1.00
                                                                0.00
       1074 C5'
                 ADE
ATOM
                         92
                                -20.341 - 28.449
                                                   3.746
                                                         1.00
                                                                0.00
                                -19.277 -29.330
ATOM
       1075 C4'
                 ADE
                         92
                                                   3.087
                                                          1.00
                                                                0.00
                 ADE
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
       1076
             04'
                         92
                                -18.221 - 29.591
                                                   3.999
                                                         1.00
ATOM
       1077
             C1'
                 ADE
                         92
                                -17.803 - 30.930
                                                   3.849
                                                                0.00
             N9
                 ADE
                         92
                                -17.099 -31.383
                                                   5.072 1.00
ATOM
       1078
                                                                0.00
                                -17.552 -31.350
                                                          1.00
ATOM
       1079
             С8
                 ADE
                         92
                                                   6.367
                                                                0.00
                                -16.693 -31.770
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1080
             N7
                 ADE
                         92
                                                   7.253
                                -15.586 -32.111
                                                          1.00
ATOM
       1081
             C5
                 ADE
                         92
                                                   6.487
                                                                0.00
ATOM
       1082
             C6
                  ADE
                         92
                                -14.321 -32.634
                                                   6.820
                                                         1.00
                                                                0.00
                                -13.975 -32.901
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1083
             N6
                  ADE
                         92
                                                   8.081
ATOM
             N1
                  ADE
                         92
                                -13.438 -32.875
                                                   5.833
                                                          1.00
                                                                0.00
       1084
       1085
             C2
                  ADE
                                -13.799 -32.613
                                                   4.579
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
                         92
ATOM
       1086
             N3
                  ADE
                         92
                                -14.954 -32.124
                                                   4.134
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        1087
             C4
                 ADE
                         92
                                -15.820 -31.886
                                                   5.154
                                                          1.00
                                                                0.00
                                -19.829 -30.699
ATOM
       1088
             C3'
                 ADE
                         92
                                                   2.663
                                                          1.00
                                                                0.00
             C2'
                 ADE
                                -19.144 -31.635
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        1089
                         92
                                                   3.659
                                -19.455 -30.942
ATOM
        1090
             03'
                  ADE
                         92
                                                   1.317
                                                          1.00
                                                                0.00
             P
                  CYT
                                -20.003 -32.210
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        1091
                         93
                                                   0.481
             OP1 CYT
                                -21.028 -32.911
                                                   1.285
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        1092
                         93
             OP2 CYT
                                -20.319 -31.763
                                                  -0.894
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1093
                         93
              05' CYT
                                -18.700 -33.149
                                                          1.00
        1094
                                                   0.419
                                                                 0.00
ATOM
                         93
              C5' CYT
                                -17.607 -32.832
                                                                 0.00
ATOM
        1095
                         93
                                                  -0.423
                                                          1.00
                                -16.467 -33.815
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1096
              C4' CYT
                                                  -0.153
                         93
              04' CYT
                                -16.134 -33.754
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1097
                         93
                                                   1.215
              C1' CYT
                                -15.602 -34.994
                                                   1.617 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1098
                         93
                                -15.783 -35.144
                                                   3.082 1.00
                                                                 0.00
        1099
             N1
                  CYT
                         93
ATOM
        1100
             C6
                  CYT
                                -16.971 -34.788
                                                   3.671
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         93
ATOM
        1101
             C5
                  CYT
                         93
                                -17.158 -34.883
                                                   5.006
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1102
              C4
                  CYT
                         93
                                 -16.052 -35.366
                                                   5.781
                                                          1.00
                                                                 0.00
              N4 CYT
                                 -16.113 -35.404
                                                                 0.00
ATOM
        1103
                         93
                                                   7.113 1.00
ATOM
        1104
              N3
                 CYT
                         93
                                 -14.906 -35.736
                                                   5.197
                                                          1.00
                                                                 0.00
        1105
              C2 CYT
                         93
                                 -14.738 -35.647
                                                   3.849
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
        1106
              02
                  CYT
                         93
                                 -13.680 -36.004
                                                    3.338
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1107
              C3' CYT
                         93
                                 -16.859 -35.276
                                                  -0.409
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1108
              C2' CYT
                          93
                                 -16.452 -36.016
                                                   0.864
                                                          1.00
                                                                 0.00
 ATOM
        1109
              03' CYT
                         93
                                 -16.165 -35.798
                                                  -1.524 1.00
                                                                 0.00
 END
 HEADER 000000
```

REMARK 0.00511 1.64003 0.02487 0.01729 2.20422 1.68349

0.00000

431 432 REMARK 2.66689 0.26937 0.48061 1.13155 0.78535 REMARK 0.01044 0.00452 0.00480 0.01989 0.00865 REMARK 122 119 3 . 0 0 0 0 REMARK 1378 305 460 273 340 REMARK 0.03510 0.18673 0.03455 0.03715 0.18673 0.08009 REMARK 0.80167 0.06524 0. 0 REMARK 1 1 0 0 0 ATOM 1 N GLU 1 20.214 -16.188 22.658 1.00 0.00 CAATOM 2 GLU 18.855 -16.290 22.098 1.00 0.00 1 ATOM 3 CBGLU 18.790 -15.633 20.713 1.00 0.00 1 CG GLU 20.750 ATOM 4 19.232 -14.165 1.00 0.00 1 0.00 ATOM 5 CDGLU 19.052 -13.523 19.380 1.00 1 ATOM 6 OE1 GLU 17.879 -13.377 18.976 1.00 0.00 1 ATOM . 7 OE2 GLU 1 20.091 -13.214 18.757 1.00 0.00 C 22.030 1.00 0.00 ATOM 8 GLU 1 18.421 -17.754 ATOM 9 0 GLU 1 19.182 -18.636 22:424 1.00 0.00 ATOM N LYS 17.206 -17.999 21.528 1.00 10 2 0.00 **ATOM** 11 CA LYS 2 16.624 -19.323 21.359 1.00 0.00 ATOM 12 CBLYS 2 15.579 -19.599 22.451 1.00 0.00 ATOM CG LYS 2 16.203 -19.654 23.853 1.00 0.00 ATOM 14 CDLYS 2 15.229 -20.224 24.898 1.00 0.00 CE LYS 13.954 -19.379 25.039 ATOM 15 1.00 0.00 ATOM NZ LYS 2 13.081 -19.884 26.116 1.00 16 0.00 ATOM 17 C LYS 2 16.001 -19.389 19.963 1.00 0.00 ATOM 0 LYS 16.408 -20.200 19.135 18 2 1.00 0.00 N HIS ATOM 19 3 15.017 -18.519 19.717 1.00 0.00 ATOM 20 CA HIS 3 14.287 -18.395 18.464 1.00 0.00 ATOM 21 CB HIS 3 13.388 -19.622 18.226 1.00 0.00 12.408 -19.983 ATOM 22 CG HIS 3 19.323 1.00 0.00 ATOM ND1 HIS 11.437 -20.956 19.129 23 3 1.00 0.00 ATOM 24 CE1 HIS 3 10.726 -21.054 20.264 1.00 0.00 ATOM 25 NE2 HIS 3 11.150 -20.218 21.214 1.00 0.00 ATOM 26 CD2 HIS 3 12.209 -19.543 20.615 1.00 0.00 ATOM С HIS 13.477 -17.099 18.514 27 3 1.00 0.00 ATOM 28 0 HIS 3 13.088 -16.670 19.598 1.00 0.00 ATOM ARG 13.223 -16.472 17.357 29 N 1.00 0.00 4 12.441 -15.242 ATOM CA ARG 17.312 1.00 0.00 30 12.579 -14.518 15.965 ATOM 31 CBARG 1.00 0.00 ATOM 32 CG ARG 14.005 -14.034 15.676 1.00 0.00 ATOM 33 CDARG 4 13.977 -12.878 14.663 1.00 0.00 ATOM 34 NE ARG 13.251 -13.237 13.430 1.00 0.00 CZ12.534 -12.399 12.652 1.00 0.00 ATOM 35 ARG ATOM NH1 ARG 12.467 -11.086 12.911 1.00 0.00 36 4

```
433
                                                                   434
ATOM
         37
             NH2 ARG
                                 11.880 -12.885 11.588
                                                         1.00 0.00
ATOM
         38
             С
                 ARG
                          4
                                 10.978 -15.590
                                                 17.574
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         39
             0
                 ARG
                          4
                                 10.375 -15.098
                                                  18.526
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         40
             N
                 ALA
                          5
                                 10.416 -16.451
                                                  16.718
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             CA
                          5
                                  9.040 -16.891
                                                  16.839
         41
                 ALA
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         42
             CB
                 ALA
                          5
                                  8.581 -17.537
                                                  15.532
                                                         1.00
                                                                0.00
             C
                                  8.906 -17.863
ATOM
         43
                 ALA
                          5
                                                  18.009
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         44
             0
                  ALA
                          5
                                  9.848 -18.576
                                                  18.348
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             N
                  ARG
                                  7.720 -17.875
                                                  18.614
         45
                          6
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             CA
                 ARG
                          6
                                  7.330 -18.697
                                                  19.748
         46
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
             CB
                 ARG
                          6
                                  6.611 - 17.762
                                                  20.727
                                                          1.00
         47
                                                                 0.00
ATOM
             CG
                  ARG
                          6
                                  5.943 -18.399
                                                  21.951
                                                          1.00
         48
                                                                 0.00
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         49
             CD
                  ARG
                          6
                                  5.135 -17.283
                                                  22.626
ATOM
         50
             NE
                  ARG
                          6
                                  4.393 -17.750
                                                  23.804
                                                          1.00
                                                               0.00
ATOM
              CZ
                 ARG
                          6
                                  3.487 -17.001
                                                  24.458
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         52
              NH1 ARG
                          6
                                  2.864 -17.495
                                                  25.534
                                                          1.00
                                                                 0.00
              NH2 ARG
ATOM
         53
                          6
                                  3.206 - 15.758
                                                  24.038
                                                          1.00
ATOM
             C
                  ARG
                                  6.419 - 19.820
                                                  19.251
         54
                          6
                                                          1.00 0.00
             0
                  ARG
                          6
                                  6.587 -20.972
                                                  19.649
ATOM
          55
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
              N
                  LYS
                          7
                                   5.459 -19.470
                                                  18.385
         56
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         57
              CA
                 LYS
                          7
                                   4.481 - 20.373
                                                  17.794
                                                          1.00
                                                                0.00
              CB
                  LYS
                          7
                                   3.082 -19.986
                                                  18.303
ATOM
          58
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
              CG
                  LYS
                          7
                                  1.910 -20.757
                                                  17.667
                                                          1.00
                                                                0.00
          59
ATOM
              CD
                  LYS
                          7
                                   2.004 -22.279
                                                  17.870
                                                          1.00
                                                                 0.00
          60
                          7
ATOM
              CE
                 LYS
                                  0.786 - 23.026
                                                  17.305
                                                          1.00
                                                                 0.00
          61
             NZ
                 LYS
                          7
                                  -0.453 - 22.742
                                                  18.058
ATOM
          62
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             C
                  LYS
                          7
                                   4.539 -20.342
                                                  16.265
                                                          1.00
                                                                 0.00
          63
ATOM
              0
                  LYS
                          7
                                   4.357 -21.383
                                                  15.639
                                                          1.00
                                                                 0.00
          64
ATOM
          65
             N
                  ARG
                          8
                                   4.762 -19.171
                                                  15.653
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CA
                  ARG
                          8
                                   4.774 -19.057
                                                  14.198
                                                          1.00
                                                                 0.00
          66
ATOM
              CB
                  ARG
                                   4.762 -17.587
                                                 13.753 1.00
                                                                 0.00
          67
                          8
ATOM
          68
              CG
                  ARG
                          8
                                   3.467 -16.874
                                                  14.164
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  ARG
ATOM
          69
              CD
                          8
                                   2.282 -17.254
                                                  13.275
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
          70
              NE
                  ARG
                          8
                                   1.023 -17.198
                                                  14.024
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CZ
                  ARG
                                  -0.191 -17.050
                                                  13.476
                                                          1.00
                                                                 0.00
          71
                          8
ATOM
          72
              NH1 ARG
                          8
                                  -0.313 -16.910
                                                  12.157
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
          73
              NH2 ARG
                                  -1.281 -17.041
                                                  14.250
                                                          1.00
                                                                 0.00
                          8
              С
                  ARG
                                                  13.533
ATOM
          74
                                   5.932 -19.802
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  ARG
ATOM
          75
              0
                                   7.071 -19.335
                                                  13.526
                                                          1.00
                                                                 0.00
                          8
          76
              N
                  GLN
                          9
                                   5.617 -20.953
                                                  12.937
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CA
                  GLN
                                   6.537 -21.792
                                                  12.198
ATOM
          77
                                                          1.00
                                                                 0.00
                          9
              CB
                  GLN
                                   5.941 -23.209
                                                  12.144
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
          78
                          9
ATOM
          79
              CG
                  GLN
                                   6.912 -24.312
                                                  11.708
                                                          1.00
                                                                 0.00
                          9
          80
              CD
                  GLN
                                   6.204 -25.658
                                                  11.509
                                                                 0.00
ATOM
                          9
                                                          1.00
ATOM
              OE1 GLN
                                   6.662 -26.494
                                                  10.736
                                                          1.00
                                                                 0.00
          81
                          9
              NE2 GLN
                                   5.075 -25.886
ATOM
          82
                          9
                                                  12.181
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
          83
              C
                  GLN
                          9
                                   6.681 -21.133
                                                  10.822
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
          84
              0
                  GLN
                          9
                                   6.045 - 21.549
                                                   9.856
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
          85
              N
                  ALA
                         10
                                   7.504 -20.081
                                                  10.741
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
          86
              CA
                  ALA
                         10
                                   7.738 - 19.336
                                                   9.510 1.00 0.00
```

	435				(===,				436
ATOM	87	СВ	ALA	10	8 727	-18.199	9.776	1.00	0.00
ATOM	88	C	ALA	10		-20.271	8.418	1.00	0.00
ATOM	89	0	ALA	10		-21.012	8.645	1.00	0.00
			TRP						0.00
ATOM	90	N CA		11		-20.252		1.00	
ATOM	91	CA	TRP	11		-21.116	6.139	1.00	0.00
ATOM	92	CB	TRP	11		-21.201	5.104	1.00	0.00
ATOM	93	CG	TRP	. 11		-21.972	5.534	1.00	0.00
ATOM	94		TRP	11		-21.588	6.468	1.00	0.00
ATOM	95		TRP	11		-22.541		1.00	0.00
ATOM	96		TRP	11		-23.606	5.752	1.00	0.00
ATOM	97		TRP	11		-24.802	5.516	1.00	0.00
ATOM	98		TRP	11		-25.704	4.567	1.00	0.00
ATOM	99		TRP	11		-25.403	3.860	1.00	0.00
ATOM	100		TRP	11		-24.200		1.00	0.00
ATOM-	101		TRP	11		-23.269		1.00	0.00
ATOM	102	C	TRP	11	9.328	-20.649	5.512	1.00	0.00
ATOM	103	0	TRP	11	9.610	-19.453	5.451	1.00	0.00
ATOM	104	N	LEU	12	10.131	-21.615	5.050	1.00	0.00
ATOM	105	CA	LEU	12	11.431	-21.428	4.408	1.00	0.00
ATOM.	106	CB	LEU	12	12.565	-21.736	5.400	1.00	0.00
ATOM	107	CG	LEU	12	12.642	-20.774	6.599	1.00	0.00
ATOM	108	CD1	LEU	12	13.659	-21.315	7.609	1.00	0.00
ATOM	109	CD2	LEU	12	13.066	-19.363	6.175	1.00	0.00
ATOM	110	C	LEU	12	11.503	-22.375	3.206	1.00	0.00
ATOM	111	0	LEU	12	10.664	-23.268	3.089	1.00	0.00
ATOM	112	N	TRP	13	12.490	-22.195	2.311	1.00	0.00
ATOM	113	CA	TRP	13	12.631	-23.026	1.114	1.00	0.00
ATOM	114	CB	TRP-	13	13.820	-22.639	0.233	1.00	0.00
ATOM	115	CG	TRP	13	15.135	-22.543	0.924	1.00	0.00
ATOM	116	CD1	TRP	13	15.715	-21.368	1.199	1.00	0.00
ATOM	117	NE1	TRP	13	16.914	-21.561		1.00	0.00
ATOM	118	CE2	TRP	13	17.166	-22.909	2.021	1.00	0.00
ATOM	119	CZ2	TRP	13	18.225	-23.616	2.610	1.00	0.00
ATOM	120	CH2	TRP	13	18.187	-25.019	2.628	1.00	0.00
ATOM	121	CZ3	TRP	13	17.097	-25.697	2.054	1.00	0.00
ATOM	122	CE3	TRP	13	16.043	-24.979	1.463	1.00	0.00
ATOM	123	CD2	TRP	13		-23.568	1.432	1.00	0.00
ATOM	124	С	TRP	13	12.677	-24.519	1.384	1.00	0.00
ATOM	125	0	TRP	13		-25.268	0.477	1.00	0.00
ATOM	126	N	GLU	14	13.049	-25.009	2.568	1.00	0.00
ATOM	127	CA	GLU	14		-26.457	2.726	1.00	0.00
ATOM	128	CB	GLU	14		-26.869	4.073	1.00	0.00
ATOM	129	CG	GLU	14		-28.385	4.320	1.00	0.00
ATOM	130	CD	GLU	14		-29.213	3.243	1.00	0.00
ATOM	131		GLU	14		-30.321	2.957	1.00	0.00
ATOM	132		GLU	14		-28.735	2.739	1.00	0.00
ATOM	133	С	GLU	14		-26.898	2.536	1.00	0.00
ATOM	134	0	GLU	14		-27.702	1.658	1.00	0.00
ATOM	135	N	GLU	15		-26.322	3.333	1.00	0.00
ATOM	136	CA	GLU	15		-26.606	3.245	1.00	0.00
				-					

	437				(220)			438
ATOM	137	СВ	GLU	15	8.549 -25.947	4.425	1.00	0.00
ATOM	138	CG	GLU	15	9.164 -26.340		1.00	0.00
ATOM	139	CD	GLU	15	8.233 -25.933	6.901	1.00	0.00
ATOM	140		GLU	15	7.925 -24.727		1.00	0.00
ATOM	140		GLU	15 15				0.00
					7.827 -26.831	7.675	1.00	
ATOM	142	C	GLU	15 15	8.690 -26.142	1.901	1.00	0.00
ATOM	143	0	GLU	15	8.101 -26.942	1.180	1.00	0.00
ATOM	144	N	ASP	16	8.848 -24.861	1.556	1.00	0.00
ATOM	145	CA	ASP	16	8.325 -24.277		1.00	0.00
ATOM	146	CB	ASP	16	8.646 -22.773		1.00	0.00
ATOM	147	CG	ASP	16	7.415 -21.911		1.00	0.00
ATOM	148		ASP	16	6.747 -22.123	1.537	1.00	0.00
ATOM	149		ASP	16	7.155 -21.030	-0.344	1.00	0.00
ATOM	150	C	ASP	16	8.829 -24.958	-0.950	1.00	0.00
ATOM	151	0	ASP	16	8.037 -25.270	-1.837	1.00	0.00
ATOM	152	N	LYS	17	10.143 -25.171	-1.063	1.00	0.00
ATOM	153	CA	LYS	17	10.736 -25.779	-2.246	1.00	0.00
ATOM	154	CB	LYS	17	12.268 -25.581	-2.255	1.00	0.00
ATOM	155	CG	LYS	17	12.890 -25.675	-3.654	1.00	0.00
ATOM	156	CD	LYS	. 17	12.756 -24.387	-4.486	1.00	0.00
ATOM	157	CE	LYS	17	13.513 -23.205	-3.857	1.00	0.00
ATOM	158	NZ	LYS	17	13.643 -22.068	-4.788	1.00	0.00
ATOM	159		. LYS	17	10.264 -27.237	-2.358	1.00	0.00
ATOM	160	0	LYS	17	9.893 -27.675	-3.450	1.00	0.00
ATOM	161	N	ASN	18	10.238 -27.981	-1.239	1.00	0.00
ATOM	162	CA	ASN	18	9.756 -29.362	-1.230	1.00	0.00
ATOM	163	CB	ASN	18	9.859 -29.971	0.173	1.00	0.00
ATOM	164	CG	ASN	18	11.279 -30.347	0.582	1.00	0.00
ATOM	165		ASN	18	12.243 -30.025	-0.109	1.00	0.00
ATOM	166		ASN	18	11.407 -31.031	1.719	1.00	0.00
ATOM	167	C	ASN	18	8.292 -29.407	-1.666	1.00	0.00
ATOM	168	0	ASN	18	7.923 -30.190	-2.538	1.00	0.00
ATOM	169	N	LEU	19	7.467 -28.557	-1.047	1.00	0.00
ATOM	170	CA	LEU	19	6.041 -28.430	-1.300	1.00	0.00
ATOM	171	CB	LEU	19	5.482 -27.302	-0.419	1.00	0.00
ATOM	172	CG	LEU	19	3.990 -27.031	-0.637	1.00	0.00
ATOM	173		LEU	19	3.166 -28.297	-0.403	1.00	0.00
ATOM	174		LEU	19	3.540 -25.915	0.312	1.00	0.00
ATOM	175	С	LEU	19	5.796 -28.177	-2.784	1.00	0.00
ATOM	176	0	LEU	19	5.016 -28.893	-3.408	1.00	0.00
ATOM	177	N	ARG	20	6.480 -27.173	-3.348	1.00	0.00
ATOM	178	CA	ARG	20	6.396 -26.818	-4.757	1.00	0.00
ATOM	179	CB	ARG	20	7.416 -25.700	-5.042	1.00	0.00
ATOM	180	CG	ARG	20	7.409 -25.111	-6.464	1.00	0.00
ATOM	181	CD	ARG	20	7.931 -26.029	-7.583	1.00	0.00
ATOM	182	NE	ARG	20	9.145 -26.771	-7.200	1.00	0.00
ATOM	183	CZ	ARG	20	10.410 -26.331	-7.284	1.00	0.00
ATOM	184		ARG	20	10.678 -25.097	-7.726	1.00	0.00
ATOM	185		2 ARG	20	11.410 -27.146	-6.925	1.00	0.00
ATOM	186	C	ARG	20	6.643 -28.071	-5.595	1.00	0.00

```
439
                                                                  440
ATOM
        187 0
                 ARG
                        20
                                 5.855 -28.398 -6.481 1.00 0.00
                 SER
                        21
                                 7.741 -28.778
                                                -5.307
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        188
            N
        189 CA
                 SER
                        21
                                 8.102 -29.996
                                                -6.017
ATOM
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        190 CB
                 SER
                        21
                                 9.460 -30.499
                                                -5.520
                                                         1.00
                                                               0.00
        191 OG
                 SER
                        21
                                 10.401 -29.442 -5.561
                                                         1.00
ATOM
                                                               0.00
                                                         1.00
ATOM
        192 C
                 SER
                        21
                                  7.006 -31.059 -5.890
                                                               0.00
ATOM
        193 0
                 SER
                        21
                                  6.695 -31.741
                                                -6.864
                                                         1.00
                                                               0.00
        194 N
ATOM
                 GLY
                        22
                                  6.418 -31.200 -4.700
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        195 CA
                 GLY
                        22
                                  5.355 -32.153 -4.431
                                                        1.00
                                                               0.00
        196 C
ATOM
                 GLY
                        22
                                  4.121 -31.872 -5.276
                                                         1.00
                                                               0.00
        197
            0
                 GLY
                        22
                                  3.643 -32.762 -5.979
ATOM
                                                         1.00
                                                               0.00
        198 N
ATOM
                 VAL
                         23
                                  3.614 -30.637 -5.218
                                                         1.00
                                                               0.00
        199 CA
                 VAL
                         23
                                  2.452 -30.231 -5.994
ATOM
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        200
            CB
                 VAL
                         23
                                  2.018 -28.800
                                                 -5.630
                                                         1.00
                                                               0.00
             CG1 VAL
ATOM
        201
                         23
                                  0.854 -28.363
                                                 -6.527
                                                         1.00
                                                               0.00
        202 CG2 VAL
ATOM
                         23
                                  1.554 -28.732
                                                -4.168
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        203
            С
                 VAL
                         23
                                  2.758 -30.403
                                                -7.484
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        204 0
                 VAL
                         23
                                  1.904 -30.862 -8.234
                                                         1.00
                                                               0.00
        205
                 ARG
                                  3.975 -30.062
                                                -7.926
ATOM
            N
                         24
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        206 CA
                 ARG
                         24
                                  4.347 -30.227 -9.323
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        207 CB
                 ARG
                                  5.723 -29.592 -9.579
                                                         1.00
                         24
                                                               0.00
ATOM
        208
             CG
                 ARG
                         24
                                  6.219 -29.742 -11.026
                                                         1.00
                                                                0.00
                 ARG
ATOM
        209
             CD
                         24
                                  5.264 -29.125 -12.058
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        210
             NE
                 ARG
                         24
                                  5.772 -29.282 -13.429
                                                         1.00
                                                                0.00
        211
             CZ
                 ARG
ATOM
                         24
                                  6.663 -28.481 -14.037
                                                         1.00
                                                                0.00
             NH1 ARG
ATOM
        212
                         24
                                  7.017 -28.726 -15.305
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        213
             NH2 ARG
                                  7.202 -27.440 -13.387
                         24
                                                         1.00
                                                                0.00
             С
ATOM
        214
                 ARG
                                  4.297 -31.707 -9.731
                         24
                                                         1.00
                                                                0.00
             0
ATOM
        215
                 ARG
                         24
                                  3.849 -32.020 -10.832
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        216
             N
                 LYS
                         25
                                  4.754 -32.618 -8.859
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
             CA LYS
                                  4.762 -34.048
        217
                         25
                                                 -9.139
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        218
             CB
                 LYS
                         25
                                  5.614 -34.802
                                                               0.00
                                                 -8.104
                                                         1.00
ATOM
        219
             CG
                 LYS
                         25
                                  7.126 -34.684
                                                 -8.314
                                                         1.00
                                                                0.00
        220
             CD
                 LYS
ATOM
                         25
                                  7.815 -35.588
                                                 -7.280
                                                         1.00
                                                               0.00
        221
             CE
                 LYS
                                  9.344 -35.500
                                                 -7.331
ATOM
                         25
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        222
             NZ
                 LYS
                         25
                                  9.843 -34.219
                                                 -6.801
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        223
             C
                 LYS
                         25
                                  3.368 -34.683
                                                 -9.135
                                                         1.00
                                                                0.00
             0
ATOM
        224
                 LYS
                         25
                                  2.963 -35.291 -10.124
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        225
             N
                 TYR
                         26
                                  2.673 -34.602
                                                -7.996
                                                         1.00
                                                                0.00
                 TYR
ATOM
        226
             CA
                                  1.392 -35.268
                                                 -7.765
                                                                0.00
                         26
                                                         1.00
ATOM
        227
             CB
                 TYR
                         26
                                  1.382 -35.787
                                                 -6.315
                                                         1.00
                                                                0.00
             CG
ATOM
        228
                 TYR
                                  2.733 -36.302
                                                 -5.847
                         26
                                                         1.00
                                                                0.00
        229
             CD1 TYR
                                                 -6.536
ATOM
                         26
                                  3.358 - 37.358
                                                         1.00
                                                                0.00
                                                                0.00
ATOM
        230
             CE1 TYR
                         26
                                  4.619 -37.821
                                                 -6.124
                                                         1.00
             CZ
ATOM
        231
                 TYR
                         26
                                  5.259 -37.231
                                                 -5.021
                                                         1.00
                                                                0.00
             OH TYR
ATOM
        232
                         26
                                  6.486 - 37.671
                                                 -4.622
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        233
             CE2 TYR
                                  4.635 -36.180
                                                 -4.328
                         26
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
         234
             CD2 TYR
                                  3.375 - 35.715
                                                 -4.739
                                                         1.00
                                                                0.00
             C
                                                 -8.027
                  TYR
                                                                0.00
ATOM
         235
                         26
                                  0.153 - 34.416
                                                         1.00
             0
ATOM
         236
                 TYR
                         26
                                 -0.953 -34.956
                                                 -8.036 1.00
                                                               0.00
```

441 237 N 27 0.312 -33.106 -8.213 1.00 0.00 ATOM GLY 27 CA GLY -0.806 -32.197 -8.405 1.00 ATOM 238 GLY 27 -1.282 -31.732 -7.030 ATOM 239 C 1.00 GLY 27 240 0 -0.895 -32.295 -6.0041.00 ATOM ATOM 241 N GLU 28 -2.125 -30.698 -6.9951.00 CA GLU 28 -2.647 -30.175 -5.7411.00 ATOM 242 CB GLU 28 -3.260 -28.792 -5.9931.00 ATOM 243 GLU CG -3.358 -27.969-4.7041.00 ATOM 244 28 245 CD GLU 28 -3.691 -26.510 -4.973 1.00 ATOM 246 OE1 GLU 28 -3.118 -25.943 -5.930 1.00 ATOM ATOM 247 OE2 GLU 28 -4.504 -25.945 -4.2101.00 C GLU -3.621 -31.185 -5.1241.00 ATOM 248 28 GLU -5.782ATOM 249 0 28 -4.032 -32.140 1.00 -3.979 -30.997 -3.852 0.00 250 N GLY 29 1.00 ATOM 0.00 ATOM 251 CA GLY 29 -4.884 -31.895 -3.1491.00 C GLY -4.266 -33.275 -2.9411.00 0.00 ATOM 252 29 ATOM 253 0 GLY 29 -4.947 -34.292 -3.0451.00 0.00 N ASN -2.964 -33.295 -2.636 1.00 0.00 ATOM 254 30 ATOM 255 CA ASN 30 -2.177 -34.494 -2.3731.00 0.00 CBASN -1.286 -34.808-3.5891.00 0.00 ATOM 256 30 ATOM 257 CG ASN 30 -2.044 -35.473 -4.7341.00 0.00 OD1 ASN -1.978 -36.691 -4.8841.00 0.00 ATOM 258 30 ATOM 259 ND2 ASN 30 -2.744 -34.695 -5.5581.00 0.00 ATOM C ASN 30 -1.333 -34.227 -1.1251.00 0.00 260 ATOM 261 0 ASN 30 -0.186 -34.660-1.0441.00 0.00 TRP -0.150 0.00 ATOM 262 N 31 -1.888 -33.497 1.00 0.00 ATOM 263 CA TRP 31 -1.166 -33.1371.063 1.00 ATOM 264 CB TRP 31 -1.930 -32.123 1.914 1.00 0.00 ATOM 265 CG TRP 31 -2.751 -31.1531.129 1.00 0.00 CD1 TRP ATOM 266 31 -4.100 -31.145 1.059 1.00 0.000.234 ATOM 267 NE1 TRP 31 -4.516 -30.1231.00 0.00 0.00 CE2 TRP -3.445 -29.418 -0.2681.00 ATOM 268 31 0.00 ATOM 269 CZ2 TRP 31 -3.350 -28.316 -1.1281.00 CH2 TRP -2.082 -27.820 -1.4560.00 **ATOM** 270 1.00 31 -0.930 -28.425 -0.9331.00 0.00 ATOM 271 CZ3 TRP 31 -1.036 -29.532 CE3 TRP -0.0721.00 0.00 ATOM 272 31 CD2 TRP -2.298 -30.055 1.00 0.00 **ATOM** 31 0.286 273 C TRP -0.714 -34.371 1.838 1.00 0.00 **ATOM** 274 31 ATOM 275 0 TRP 31 0.397 - 34.3702.357 1.00 0.00 **ATOM** 276 N SER 32 -1.534 -35.4281.901 1.00 0.00 SER ATOM 277 CA 32 -1.159 -36.6632.582 1.00 0.00 ATOM 278 CBSER 32 -2.320 -37.664 2.516 1.00 0.00 ATOM 279 0G SER 32 -1.974 -38.8823.148 1.00 0.00 ATOM 280 C SER 32 0.124 - 37.2251.954 1.00 0.00 SER 1.00 0.00 ATOM 281 0 32 1.113 - 37.4732.644 ATOM 282 N LYS 33 0.116 - 37.4150.628 1.000.00 1.272 -37.922 ATOM 283 CA LYS 33 -0.0981.00 0.00 CBLYS 0.974 - 37.9780.00 ATOM 284 33 -1.6031.00 CG 33 -0.035 -39.059 -2.018 1.00 0.00 ATOM 285 LYS CD LYS 33 0.380 -40.499 -1.670 1.00 0.00 ATOM 286

```
443
                                                                    444
ATOM
        287
             CE LYS
                         33
                                  1.848 -40.834 -1.978 1.00 0.00
ATOM
        288
             NZ
                 LYS
                         33
                                  2.223 -40.545
                                                  -3.375 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        289
             C
                 LYS
                         33
                                  2.485 - 37.029
                                                   0.162 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        290
             0
                 LYS
                         33
                                  3.554 - 37.521
                                                   0.516
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        291
             N
                  ILE
                         34
                                   2.308 -35.718
                                                  -0.014 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        292
             CA
                 ILE
                         34
                                   3.332 -34.703
                                                   0.182
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        293
             CB
                 ILE
                                   2.728 -33.330
                                                  -0.173
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         34
ATOM
        294
             CG2 ILE
                         34
                                   3.529 -32.150
                                                   0.380
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        295
             CG1 ILE
                         34
                                   2.588 -33.241
                                                  -1.706
                                                          1.00
                                                                0.00
             CD1 ILE
ATOM
        296
                         34
                                   1.743 -32.058
                                                  -2.191
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                                 0.00
ATOM
        297
             C
                  ILE
                                   3.950 -34.816
                                                          1.00
                         34
                                                   1.584
ATOM
        298
             0
                  ILE
                         34
                                   5.172 -34.790
                                                    1.706
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        299
             N
                  LEU
                         35
                                   3.132 -34.969
                                                   2.634
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        300
             CA
                 LEU
                         35
                                   3.594 -35.129
                                                    4.011 1.00
                                                                 0.00
ATOM
             CB
                  LEU
        301
                         35
                                   2.401 -35.266
                                                    4.974
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        302
             CG
                 LEU
                         35
                                   1.705 -33.936
                                                    5.287
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         303
             CD1 LEU
                         35
                                   0.291 - 34.191
                                                    5.821
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         304
             CD2 LEU
                         35
                                   2.487 - 33.133
                                                    6.333
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         305
             С
                  LEU
                                   4.481 -36.369
                                                           1.00
                         35
                                                    4.131
                                                                 0.00
ATOM
         306
             0
                  LEU
                         35
                                   5.517 -36.329
                                                    4.792
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N
                  LEU
ATOM
         307
                         36
                                   4.078 - 37.478
                                                    3.499
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         308
             CA
                 LEU
                         36
                                   4.848 -38.712
                                                    3.556
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CB
                  LEU
ATOM
         309
                         36
                                   4.022 - 39.898
                                                    3.025
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         310
             CG
                 LEU
                         36
                                   3.248 - 40.677
                                                    4.106
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CD1 LEU
         311
                         36
                                   4.188 -41.466
                                                    5.029
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         312
             CD2 LEU
                         36
                                   2.317 -39.790
                                                    4.939
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C
ATOM
         313
                  LEU
                                   6.185 - 38.573
                         36
                                                    2.824
                                                           1.00
                                                                 0.00
             0
                  LEU
ATOM
         314
                         36
                                   7.226 -38.919
                                                    3.385
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             N
                  HIS
         315
                         37
                                   6.164 - 38.082
                                                    1.581
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         316
              CA
                 HIS
                         37
                                   7.357 -37.909
                                                    0.766
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CB HIS
ATOM
         317
                         37
                                   6.966 -37.463
                                                   -0.649
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CG HIS
                         37
         318
                                   6.298 - 38.541
                                                  -1.464
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         319
              ND1 HIS
                         37
                                   6.947 -39.712
                                                  -1.824
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CE1 HIS
ATOM
         320
                         37
                                   6.080 -40.447
                                                  -2.540
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             NE2 HIS
                                   4.894 -39.852
         321
                         37
                                                  -2.689
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         322
              CD2 HIS
                                   5.039 -38.647
                         37
                                                   -2.005
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         323
             C
                  HIS
                         37
                                   8.337 -36.917
                                                    1.395
                                                           1.00
                                                                 0.00
             0
                  HIS
ATOM
         324
                         37
                                   9.488 - 37.266
                                                    1.647
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         325
             N
                  TYR
                          38
                                   7.882 -35.684
                                                    1.635
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CA
                 TYR
         326
                                   8.674 -34.613
                                                           1.00
                          38
                                                    2.206
                                                                 0.00
ATOM
         327
              CB
                  TYR
                          38
                                   8.373 -33.312
                                                    1.457
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         328
              CG TYR
                                   8.459 -33.431
                                                   -0.055
                          38
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CD1 TYR
ATOM
         329
                          38
                                   7.288 - 33.653
                                                   -0.797
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         330
             CE1 TYR
                          38
                                   7.346 -33.763
                                                  -2.193
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         331
             CZ TYR
                          38
                                   8.574 -33.646
                                                  -2.862
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OH TYR
ATOM
         332
                          38
                                   8.615 -33.747
                                                  -4.224
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         333
              CE2 TYR
                                   9.751 -33.425
                                                  -2.125
                          38
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         334
              CD2 TYR
                          38
                                   9.695 -33.321
                                                   -0.723
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C
                                   8.317 -34.521
         335
                  TYR
                          38
                                                    3.684
                                                           1.00
                                                                 0.00
             0
                  TYR
ATOM
         336
                          38
                                   7.229 - 34.076
                                                    4.034 1.00 0.00
```

	445				• • • •				446	
<b>АТОИ</b>	445	N	I VC	20	0 227 -24 (	065	4 550	1 00	446	
ATOM	337		LYS	39	9.227 -34.9		4.550			
ATOM	338		LYS	39	9.018 -34.9		5.986	1.00	0.00	
ATOM	339		LYS	39	9.823 -36.		6.595	1.00	0.00	
ATOM	340	CC	LYS	39	9.437 -37.		5.905	1.00	0.00	
ATOM	341	CD	LYS	39	10.073 -38.		6.601	1.00	0.00	
ATOM	342	CE	LYS	39	9.916 -39.		5.764	1.00	0.00	
ATOM	343	NZ	LYS	39	8.508 -40.		5.437	1.00	0.00	
ATOM	344	C	LYS	39	9.344 -33.		6.577	1.00	0.00	
ATOM	345	0	LYS	39	10.457 -33.		7.042	1.00	0.00	
ATOM	346	N	PHE	40	8.352 -32.		6.546	1.00	0.00	
ATOM	347	CA	PHE	40	8.429 -31.		7.052	1.00	0.00	
ATOM	348		PHE	40	7.096 -30.		6.785	1.00	0.00	•
ATOM	349	CG	PHE	40	6.657 -30.	494	5.338	1.00	0.00	
ATOM	350	CD1	PHE	40	5.958 -31.	537	4.708	1.00	0.00	
ATOM	351	CE1	PHE	40	5.554 -31.	414	3.369	1.00	0.00	
ATOM	352		PHE	40	5.838 -30.	240	2.646	1.00	0.00	
ATOM	353	CE2	PHE	40	6.528 -29.	194	3.278	1.00	0.00	
ATOM	354	.CD2	PHE	40	6.938 -29.	321	4.616	1.00	0.00	
ATOM	355	C	PHE	40	8.710 -31.	309	8.560	1.00	0.00	
ATOM	356	0	PHE	40	8.664 -32.	339	9.230	1.00	0.00	
ATOM	357	N	ASN	41	8.987 -30.	112	9.098	1.00	0.00	
ATOM	358	CA	ASN	41	9.271 -29.	915	10.517	1.00	0.00	
ATOM	359	CB	ASN	41	9.600 -28.	445	10.819	1.00	0.00	
ATOM	360	CG	ASN	41	10.717 -27.	892	9.943	1.00	0.00	
ATOM	361	0D1	ASN	41	11.894 -28.	101	10.221	1.00	0.00	
ATOM	362	ND2	ASN	41	10.347 -27.	171	8.885	1.00	0.00	
ATOM	363	C	ASN	41	8.084 -30.	374	11.368	1.00	0.00	
ATOM	364	0	ASN	41	. 8.217 -31.	282	12.185	1.00	0.00	
ATOM	365	N	ASN	42	6.924 -29.	738	11.170	1.00	0.00	
ATOM	366	CA	ASN	42	5.694 -30.	040	11.891	1.00	0.00	
ATOM	367	CB	ASN	42	5.764 -29.	432	13.302	1.00	0.00	
ATOM	368	CG	ASN	42	4.476 -29.	643	14.095	1.00	0.00	
ATOM	369	0D1	ASN	42	3.794 -28.	685-	14.447	1.00	0.00	
ATOM	370	ND2	ASN	42	4.141 -30.	899	14.394	1.00	0.00	
ATOM	371	C	ASN	42	4.528 -29.	486	11.072	1.00	0.00	
ATOM	372	0	ASN	42	3.998 -28.	.422	11.389	1.00	0.00	
ATOM	373	N	ARG	43	4.146 -30.	.201	10.007	1.00	0.00	
ATOM	374	CA	ARG	43	3.077 -29.	.801	9.102	1.00	0.00	
ATOM	375	CB	ARG	43	3.649 -29.	.534	7.702	1.00	0.00	
ATOM	376	CG	ARG	43	4.718 -28	.433	7.707	1.00	0.00	
ATOM	377	CD	ARG	43	4.134 -27	.096	8.151	1.00	0.00	
ATOM	378	NE	ARG	43	5.139 -26		8.121	1.00	0.00	
ATOM	379	CZ	ARG	43	4.913 -24	.803	8.600	1.00	0.00	
ATOM	380	NH1	ARG	43	5.871 -23		8.511	1.00	0.00	
ATOM	381		2 ARG	43	3.730 -24		9.157	1.00	0.00	
ATOM	382	C	ARG	43	1.947 -30		9.052	1.00	0.00	
ATOM	383	0	ARG	43	2.097 -31		9.483	1.00	0.00	
ATOM	384	N	THR	44	0.811 -30		8.519	1.00	0.00	
ATOM	385	CA	THR	44	-0.427 -31		8.353	1.00	0.00	
ATOM	386	CB	THR	44	-1.373 -30		9.519	1.00	0.00	

(225)447 448 ATOM 387 CG2 THR -0.776 -31.12810.882 1.00 0.00 44 OG1 THR ATOM 388 44 -1.700 -29.387 9.484 1.00 0.00 ATOM 389 C THR -1.088 -30.632 7.060 1.00 0.00 44 390 0 THR -0.660 -29.6421.00 0.00 ATOM 44 6.463 ATOM 391 N SER 45 -2.156 -31.326 6.655 1.00 0.00 ATOM 392 CA SER 45 -2.945 -30.984 5.484 1.00 0.00 ATOM 393 CB SER 45 -4.166 -31.908 5.433 1.00 0.00 0G SER ATOM 394 45 -3.759 -33.2415.653 1.00 0.00 SER ATOM 395 C 45 -3.375 -29.5195.579 1.00 0.00 0 SER ATOM 396 45 -3.286 - 28.7784.604 1.00 0.00 VAL ATOM 397 N 46 -3.824 -29.110 6.774 1.00 0.00 VAL ATOM 398 CA 46 -4.251 -27.755 7.079 1.00 0.00 CB VAL ATOM 399 46 -4.728 -27.667 8.541 1.00 0.00 CG1 VAL -5.132 -26.234 ATOM 400 46 8.909 1.00 0.00CG2 VAL ATOM 401 46 -5.933 -28.590 8.773 1.00 0.00 C VAL -3.116 -26.777 0.00 ATOM 402 46 6.769 1.00 0 VAL -3.285 -25.906 ATOM 403 46 5.9191.00 0.00N MET -1.972 -26.930 ATOM 404 47 7.448 1.00 0.00 ATOM CA MET -0.819 - 26.055405 47 7.257 1.00 0.00CBMET 0.380 -26.591 1.00 0.00 ATOM 406 47 8.048 CG MET ATOM 407 47 0.177 - 26.6329.566 1.00 0.00 ATOM 408 SD MET 47 0.355 - 25.03110.384 1.00 0.00 ATOM CE MET 0.320 - 25.57212.108 1.00 0.00 409 47 ATOM 410 C MET 47 -0.434 - 25.9195.777 1.00 0.00 MET ATOM 411 0 47 -0.274 - 24.8095.268 1.00 0.00 N LEU -0.277 -27.060 ATOM 412 48 5.097 1.00 0.00 ATOM 413 CA LEU 0.108 - 27.1253.693 48 1.00 0.00 ATOM 414 CB LEU 48 0.257 -28.589 3.263 1.00 0.00 CG LEU ATOM 415 48 1.488 -29.224 3.927 1.00 0.00 ATOM CD1 LEU 1.353 -30.740 4.009 1.00 416 48 0.00 ATOM 417 CD2 LEU 48 2.764 -28.938 3.134 1.00 0.00 **ATOM** 418 C LEU 48 -0.883 -26.369 2.812 1.00 0.00 ATOM 419 0 LEU 48 -0.471 -25.5142.025 1.00 0.00 LYS ATOM 420 N 49 -2.181 -26.671 2.954 1.00 0.00 ATOM 421 CA LYS 49 -3.225 -25.998 2.196 1.00 0.00 ATOM 422 CB LYS 49 -4.621 -26.382 2.693 1.00 0.00 ATOM CG LYS 423 49 -5.126 -27.693 2.117 1.00 0.00 ATOM CDLYS -6.579 -27.934 424 49 2.527 1.00 0.00 ATOM 425 CE LYS 49 -6.811 -27.890 4.046 1.00 0.00 NZ LYS -7.221 -26.545 ATOM 426 49 4.524 1.00 0.00 ATOM 427 C LYS 49 -3.104 -24.498 2.382 1.00 0.00 ATOM 428 0 LYS 49 -3.032 -23.774 1.402 1.00 0.00 N ASP -3.111 -24.041 ATOM 429 50 3.635 1.00 0.00 CA ASP -3.050 -22.632 3.983 1.00 0.00 ATOM 430 50 ATOM 431 CB ASP 50 -2.992 -22.477 5.502 1.00 0.00 ATOM 432 CG ASP 50 -4.198 -23.091 6.207 1.00 0.00 OD1 ASP ATOM 433 50 -4.036 -23.447 7.394 1.00 0.00 OD2 ASP ATOM 434 50 -5.264 -23.201 5.559 1.00 0.00

ATOM

ATOM

435 C

436 0 ASP

ASP

50

50

-1.886 -21.921

-2.097 -20.910

3.301

1.00

2.633 1.00 0.00

0.00

```
449
                                                                    450
ATOM
        437
             N
                  ARG
                         51
                                  -0.665 -22.440
                                                    3.458 1.00 0.00
        438
ATOM
             CA
                  ARG
                         51
                                   0.513 - 21.843
                                                    2.843
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        439
             CB
                  ARG
                         51
                                   1.758 -22.674
                                                    3.184
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        440
             CG
                  ARG
                         51
                                   3.021 -22.219
                                                    2.432
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  ARG
                                   3.462 -20.806
ATOM
        441
             CD
                         51
                                                    2.827
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        442
             NE
                  ARG
                         51
                                   4.676 -20.410
                                                    2.099
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        443
              CZ
                  ARG
                         51
                                   5.044 -19.145
                                                    1.838
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              NH1 ARG
                         51
                                   4.449 -18.117
                                                    2.451
                                                          1.00
                                                                 0.00
        444
ATOM
        445
              NH2 ARG
                                   6.014 -18.904
                                                    0.950
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         51
              C
ATOM
        446
                  ARG
                         51
                                   0.336 - 21.732
                                                    1.330
                                                           1.00 0.00
              0
                                   0.484 -20.651
ATOM
        447
                  ARG
                         51
                                                    0.758
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             N
                  TRP
                                   0.030 - 22.859
        448
                         52
                                                    0.682
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        449
              CA
                  TRP
                         52
                                  -0.136 -22.917
                                                   -0.758
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        450
              CB
                  TRP
                         52
                                  -0.330 -24.375
                                                   -1.159
                                                           1.00
                                                                  0.00
              CG
                  TRP
                                  -0.164 -24.630
                                                   -2.616
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         451
                          52
ATOM
              CD1 TRP
                                  -1.167 -24.899
                                                   -3.473
                                                           1.00
                                                                  0.00
        452
                          52
ATOM
         453
              NE1 TRP
                                  -0.666 -25.091
                                                   -4.741
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          52
ATOM
         454
              CE2 TRP
                          52
                                   0.706 - 24.939
                                                   -4.760
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              CZ2 TRP
                          52
                                   1.667 -25.024
                                                   -5.776
                                                           1.00
                                                                  0.00
         455
ATOM
              CH2 TRP
                                   3.019 - 24.813
                                                   -5.467
                                                           1.00
                                                                  0.00
         456
                          52
ATOM
              CZ3 TRP
                          52
                                   3.396 -24.516
                                                   -4.146
                                                           1.00
                                                                  0.00
         457
ATOM
         458
              CE3 TRP
                          52
                                   2.425 -24.432
                                                   -3.131
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         459
              CD2 TRP
                          52
                                   1.057 - 24.642
                                                   -3.411
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C
                  TRP
ATOM
         460
                          52
                                  -1.286 -22.033
                                                   -1.248
                                                            1.00
                                                                  0.00
                  TRP
ATOM
         461
              0
                          52
                                  -1.217 - 21.467
                                                   -2.334
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         462
              N
                  ARG
                          53
                                  -2.341 -21.907
                                                   -0.443
                                                           1.00
                                                                  0.00
              CA
                  ARG
                                  -3.521 -21.107
                                                   -0.718
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         463
                          53
ATOM
              CB
                  ARG
                                  -4.603 -21.477
                                                    0.302
                                                           1.00
                                                                  0.00
         464
                          53
                  ARG
                                                                  0.00
ATOM
              CG
                          53
                                  -5.942 -20.771
                                                    0.097
                                                            1.00
         465
                  ARG
                                  -7.046 -21.559
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         466
              CD
                          53
                                                    0.816
              NE
                  ARG
                          53
                                  -6.765 -21.752
                                                    2.255
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         467
ATOM
         468
              CZ
                  ARG
                          53
                                  -7.451 -21.215
                                                    3.279
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              NH1 ARG
                          53
                                  -8.398 -20.299
                                                    3.060
                                                           1.00
                                                                  0.00
         469
ATOM
         470
              NH2 ARG
                          53
                                  -7.202 -21.601
                                                    4.538
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  ARG
ATOM
         471
              C
                          53
                                  -3.116 -19.635
                                                   -0.714
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                                                  0.00
ATOM
         472
              0
                  ARG
                          53
                                  -3.484 -18.896
                                                   -1.628
                                                           1.00
ATOM
                  THR
                                  -2.329 -19.213
                                                    0.286
                                                            1.00
                                                                  0.00
         473
              N
                          54
ATOM
         474
              CA
                  THR
                          54
                                  -1.823 -17.849
                                                    0.348
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         475
              CB
                  THR
                          54
                                   -0.989 -17.619
                                                    1.619
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         476
              CG2 THR
                                   -0.503 -16.167
                                                    1.703
                                                           1.00
                                                                  0.00
              OG1 THR
                                   -1.775 - 17.895
                                                                  0.00
ATOM
         477
                          54
                                                    2.760
                                                            1.00
 ATOM
         478
              С
                  THR
                          54
                                  -1.002 -17.597
                                                   -0.918
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                  -1.219 -16.595
 ATOM
         479
              0
                  THR
                          54
                                                   -1.589
                                                            1.00
                                                                  0.00
              N
                  MET
                                   -0.082 -18.512
                                                                  0.00
 ATOM
         480
                          55
                                                   -1.257
                                                            1.00
 ATOM
         481
              CA
                  MET
                          55
                                   0.744 - 18.397
                                                   -2.454
                                                            1.00
                                                                  0.00
 ATOM
              CB
                  MET
                                    1.693 -19.598
                                                   -2.569
         482
                          55
                                                            1.00
                                                                  0.00
              CG
                  MET
                                    2.880 -19.508
 ATOM
         483
                          55
                                                   -1.599
                                                            1.00
                                                                  0.00
 ATOM
              SD
                  MET
                          55
                                    3.890 -18.001
                                                   -1.697
                                                            1.00
                                                                  0.00
         484
 ATOM
         485
              CE
                  MET
                          55
                                    4.165 -17.925
                                                   -3.486
                                                            1.00
                                                                  0.00
 ATOM
                  MET
                                   -0.110 -18.237 -3.716 1.00 0.00
         486
              C
                          55
```

```
451
                                                                   452
            0
ATOM
        487
                 MET
                         55
                                  0.144 - 17.342 - 4.522
                                                          1.00 0.00
        488
             N
                 LYS
                         56
                                 -1.126 -19.090 -3.885
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
        489
             CA
                 LYS
                         56
                                 -2.035 -19.037
                                                  -5.020
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 LYS
        490
             CB
                                 -3.066 -20.172 -4.947
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         56
ATOM
        491
             CG
                 LYS
                         56
                                 -2.409 -21.486
                                                  -5.381
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CD
                 LYS
                                 -3.303 -22.704
ATOM
        492
                         56
                                                  -5.143
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             CE
                 LYS
                                 -4.559 -22.736
        493
                         56
                                                  -6.023
                                                           1.00
                                                                 0.00
             NZ
                 LYS
ATOM
        494
                         56
                                 -5.119 -24.099
                                                  -6.074
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C
ATOM
        495
                  LYS
                         56
                                 -2.712 -17.666
                                                  -5.122
                                                           1.00
                                                                 0.00
             0
ATOM
        496
                  LYS
                         56
                                 -2.776 -17.090
                                                  -6.203
                                                           1.00
                                                                 0.00
             N
                  LYS
ATOM
        497
                         57
                                  -3.214 -17.126
                                                  -4.008
                                                           1.00
                                                                 0.00
             CA
                 LYS
                                  -3.857 -15.817
ATOM
        498
                         57
                                                  -4.023
                                                           1.00
                                                                 0.00
             CB
                 LYS
ATOM
        499
                         57
                                  -4.662 -15.605
                                                  -2.734
                                                           1.00
                                                                 0.00
             CG
                 LYS
ATOM
         500
                         57
                                  -5.860 -16.565
                                                  -2.672
                                                           1.00
                                                                 0.00
             CD
                  LYS
ATOM
        501
                         57
                                  -6.859 -16.200
                                                  -1.565
                                                           1.00
                                                                 0.00
             CE
                  LYS
ATOM
        502
                         57 -
                                  -6.256 -16.323
                                                  -0.161
                                                           1.00
                                                                 0.00
             NZ
                  LYS
ATOM
                                  -7.276 -16.104
        503
                         57
                                                   0.884
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C
                  LYS
                         57
ATOM
         504
                                  -2.839 -14.687
                                                  -4.235
                                                           1.00
                                                                 0.00
             0
                  LYS
ATOM
         505
                         57
                                  -3.169 -13.674
                                                  -4.847
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         506
             N
                  LEU
                                  -1.617 -14.851
                                                  -3.720
                         58
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             CA
                 LEU
         507
                         58
                                  -0.544 -13.870
                                                  -3.789
                                                           1.00
                                                                 0.00
             CB
                 LEU
ATOM
         508
                         58
                                   0.479 - 14.194
                                                  -2.685
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CG
                 LEU
                                   1.690 -13.249
         509
                         58
                                                  -2.625
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             CD1 LEU
         510
                         58
                                   1.294 -11.869
                                                  -2.086
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         511
              CD2 LEU
                         58
                                   2.756 -13.879
                                                  -1.725
                                                           1.00
                                                                 0.00
             С
                  LEU
ATOM
         512
                         58
                                   0.118 - 13.800
                                                  -5.168
                                                                 0.00
                                                           1.00
ATOM
                  LEU
         513
             0
                                  -0.048 - 12.814
                                                  -5.883
                                                                 0.00
                         58
                                                           1.00
ATOM
              N
                  LYS
         514
                         59
                                   0.899 - 14.827
                                                  -5.522
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CA
                 LYS
         515
                         59
                                   1.653 -14.899
                                                  -6.767
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CB
                  LYS
                         59
                                   3.032 -15.507
         516
                                                  -6.470
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         517
              CG LYS
                         59
                                   3.962 -15.433
                                                  -7.688
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CD
                  LYS
ATOM
         518
                         59
                                   5.378 -15.883
                                                  -7.317
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         519
              CE
                  LYS
                         59
                                   6.290 - 15.796
                                                  -8.548
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         520
              NZ
                  LYS
                         59
                                   7.671 -16.209
                                                  -8.236
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         521
              C
                  LYS
                         59
                                   0.921 - 15.685
                                                  -7.852
                                                                 0.00
                                                           1.00
ATOM
         522
              0
                  LYS
                         59
                                   1.096 ~15.394
                                                  -9.033
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         523
              N
                  LEU
                         60
                                   0.123 - 16.682
                                                  -7.459
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CA
                  LEU
ATOM
         524
                         60
                                  -0.629 -17.533
                                                  -8.371
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         525
              CB
                  LEU
                         60
                                  -1.559 -16.711
                                                  -9.286
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CG
                 LEU
         526
                         60
                                  -2.817 -17.479
                                                  -9.733
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         527
              CD1 LEU
                         60
                                  -3.733 -16.525 -10.507
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         528
              CD2 LEU
                                  -2.499 -18.689 -10.618
                         60
                                                           1.00
                                                                 0.00
              С
                  LEU
ATOM
         529
                         60
                                   0.299 - 18.504
                                                  -9.101
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         530
             0
                  LEU
                         60
                                   0.666 -18.305 -10.256
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         531
             N
                  ILE
                         61
                                   0.664 - 19.577
                                                  -8.395
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         532
              CA ILE
                                   1.521 -20.638
                                                  -8.893
                         61
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CB ILE
                                                  -7.738
ATOM
         533
                         61
                                   2.389 -21.169
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         534
              CG2 ILE
                                   3.254 -22.351
                                                   -8.188
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CG1 ILE
ATOM
         535
                                   3.268 -20.000
                                                  -7.248
                                                                 0.00
                          61
                                                           1.00
              CD1 ILE
                                   4.391 -20.427 -6.306 1.00
ATOM
         536
                         61
                                                                0.00
```

```
453
                                                                  454
ATOM
        537 C
                 ILE
                        61
                                  0.619 -21.678 -9.561 1.00 0.00
            0
                 ILE
        538
                        61
                                  0.173 -22.636 -8.932
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
                 SER
ATOM
        539
            N
                        62
                                  0.354 -21.447 -10.851
                                                         1.00
                                                               0.00
                 SER
                        62
ATOM
        540 CA
                                 -0.495 -22.247 -11.725
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        541 CB
                 SER
                        62
                                 -0.467 -21.630 -13.130
                                                         1.00
                                                                0.00
                 SER
                        62
                                                               0.00
ATOM
        542 OG
                                 -0.791 -20.256 -13.065
                                                         1.00
ATOM
        543
             C
                 SER
                        62
                                 -0.080 -23.721 -11.776
                                                         1.00
                                                                0.00
        544 0
                 SER
                        62
                                                                0.00
ATOM
                                  0.699 -24.122 -12.638
                                                         1.00
ATOM
        545 N
                 SER
                         63
                                 -0.614 -24.524 -10.852
                                                         1.00
                                                                0.00
        546
             CA
                 SER
                         63
                                 -0.351 -25.950 -10.738
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
ATOM
        547
             CB
                 SER
                         63
                                  1.111 -26.194 -10.330
                                                         1.00
                                                                0.00
                 SER
            OG.
                                  1.489 -25.382 -9.239
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        548
                         63
        549
             C
                 SER
                         63
                                 -1.363 -26.540 -9.753
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
                 SER
        550 0
                         63
                                 -1.000 - 26.992 - 8.669
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
ATOM
        551
             N
                 ASP
                                 -2.640 -26.513 -10.150
                                                         1.00
                                                                0.00
                         64
        552 CA
                 ASP
                                 -3.753 -27.007 -9.355
                                                                0.00
ATOM
                         64
                                                         1.00
             CB
                 ASP
                                                 -9.724
                                                                0.00
ATOM
        553
                         64
                                 -5.019 -26.209
                                                         1.00
             CG
                 ASP
                                 -6.093 -26.257 -8.636
                                                               0.00
ATOM
        554
                         64
                                                         1.00
ATOM
             OD1 ASP
                                 -6.567 -27.373
                                                 -8.335
                                                         1.00
                                                                0.00
        555
                         64
             OD2 ASP
ATOM
        556
                         64
                                 -6.417 - 25.163
                                                 -8.120
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        557
             C
                  ASP
                                 -3.874 -28.531
                                                 -9.514
                                                         1.00
                                                                0.00
                         64
             0
                  ASP
                                 -2.883 -29.248
                                                 -9.375
                                                                0.00
ATOM
        558
                         64
                                                         1.00
ATOM
        559
             N
                  SER
                         65
                                 -5.076 -29.037
                                                 -9.792
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
             CA
                 SER
                                 -5.383 -30.448
                                                 -9.935
                                                          1.00
                                                                0.00
        560
                         65
ATOM
             CB
                 SER
                                 -5.711 -30.984
                                                 -8.536
                                                          1.00
                                                                0.00
        561
                         65
ATOM
             0G
                  SER
                                 -6.759 -30.232 -7.949
                                                          1.00
                                                                0.00
        562
                         65
ATOM
        563
             C
                  SER
                                 -6.567 -30.636 -10.887
                                                          1.00
                                                                0.00
                         65
ATOM
             0
                  SER
                         65
                                 -7.213 -29.664 -11.280
                                                          1.00
                                                                0.00
        564
ATOM
         565
             N
                  GLU
                         66
                                 -6.848 -31.894 -11.242
                                                          1.00
                                                                0.00
             CA
                  GLU
                                 -7.944 -32.288 -12.115
                                                                0.00
ATOM
         566
                         66
                                                          1.00
ATOM
         567
             CB
                  GLU
                         66
                                 -7.587 -32.055 -13.594
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
              CG
                  GLU
                                 -6.302 -32.764 -14.049
                                                          1.00
                                                                0.00
         568
                         66
ATOM
         569
              CD GLU
                         66
                                 -5.994 -32.476 -15.517
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         570
              OE1 GLU
                         66
                                 -5.872 -33.458 -16.283
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         571
              OE2 GLU
                         66
                                 -5.881 -31.275 -15.848
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         572
             C
                  GLU
                         66
                                 -8.299 -33.745 -11.814
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         573
             0
                  GLU
                         66
                                 -7.452 -34.497 -11.329
                                                          1.00
                                                                0.00
                  ASP
                                 -9.549 -34.128 -12.090
                                                                0.00
ATOM
         574
              N
                         67
                                                          1.00
              CA ASP
                         67
                                -10.093 -35.460 -11.870
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
         575
             CB
                                -10.441 -35.638 -10.383
ATOM
         576
                 ASP
                                                          1.00
                                                                0.00
                         67
              CG
                 ASP
                                -10.972 -37.036 -10.075
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         577
                         67
              OD1 ASP
                                -10.158 -37.984 -10.140
                                                          1.00
ATOM
         578
                         67
                                                                0.00
ATOM
         579
              OD2 ASP
                         67
                                -12.174 -37.131 -9.739
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         580
              C
                  ASP
                         67
                                -11.336 -35.605 -12.753
                                                          1.00
                                                                0.00
              OT1 ASP
                                -11.367 -36.600 -13.511
                                                                0.00
ATOM
         581
                         67
                                                          1.00
 ATOM
         582
              OT2 ASP
                                -11.990 -34.553 -12.946
                                                          1.00
                                                                0.00
                         67
              05' GUA
                                 -7.846 -40.119 12.226
                                                          1.00
                                                                0.00
 ATOM
         583
                         68
         584
              C5' GUA
                         68
                                 -7.501 -40.811 11.043
                                                          1.00
                                                                0.00
 ATOM
 ATOM
         585
              C4' GUA
                         68
                                  -7.744 -39.955
                                                   9.796
                                                          1.00
                                                                0.00
 ATOM
         586
             04' GUA
                         68
                                  -9.080 -39.496
                                                   9.729 1.00 0.00
```

```
455
                                                                    456
             C1' GUA
                                                   8.718 1.00 0.00
ATOM
        587
                         68
                                 -9.124 -38.512
ATOM
        588
             N9
                  GUA
                         68
                                -10.299 -37.627
                                                   8.848
                                                          1.00
                                                                0.00
                                -10.707 -36.920
        589
             C8
                  GUA
                                                   9.945 1.00
                                                                0.00
ATOM
                         68
ATOM
        590
             N7
                  GUA
                         68
                                 -11.811 -36.248
                                                   9.767 1.00
                                                                 0.00
                  GUA
             C5
                         68
                                 -12.147 -36.508
                                                   8.442 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        591
        592
             60
                  GUA
                                -13.253 -36.055
                                                   7.660
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         68
                  GUA
                                 -14.222 -35.395
ATOM
        593
             06
                                                   8.028
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         68
                                                          1.00
ATOM
        594
             N1
                  GUA
                         68
                                 -13.159 -36.448
                                                    6.330
                                                                 0.00
ATOM
        595
             C2
                  GUA
                         68
                                 -12.148 -37.235
                                                   5.816 1.00 0.00
ATOM
        596
             N2
                  GUA
                         68
                                 -12.179 -37.524
                                                    4.515
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N3
                  GUA
                                 -11.138 -37.706
ATOM
        597
                         68
                                                   6.558
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        598
             C4
                  GUA
                         68
                                 -11.193 -37.306
                                                    7.856
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C3'
                  GUA:
ATOM
        599
                         68
                                  -6.908 -38.671
                                                    9.732 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        600
             C2'
                  GUA
                         68
                                  -7.838 -37.743
                                                    8.951
                                                          1.00
                                                                 0.00
              03'
                  GUA
                                  -5.675 -38.920
ATOM
        601
                         68
                                                    9.077
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        602
             P
                  THY
                         69
                                  -4.616 -37.744
                                                    8.719
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        603
              OP1 THY
                         69
                                  -3.342 -38.383
                                                    8.326
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        604
              OP2 THY
                         69
                                  -4.637 -36.756
                                                    9.821
                                                           1.00
                                                                 0.00
              05'
                  THY
                                  -5.257 -37.054
ATOM
        605
                         69
                                                    7.405
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        606
              C5*
                  THY
                         69
                                  -5.615 -37.831
                                                    6.276
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        607
              C4'
                  THY
                                  -6.587 -37.088
                                                    5.348
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         69
ATOM
        608
              04'
                  THY
                         69
                                  -7.788 -36.632
                                                    5.930
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
        609
              C1'
                         69
                                  -8.268 -35.526
                                                    5.203
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        610
              N1
                  THY
                         69
                                  -9.262 -34.791
                                                    6.033
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C6
                  THY
ATOM
        611
                         69
                                  -9.007 -34.592
                                                    7.367
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
        612
              C5
                         69
                                  -9.867 -33.900
                                                    8.153
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              С7
                  THY
                                  -9.452 -33.703
        613
                                                    9.600
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         69
                  THY
ATOM
              C4
                                 -11.108 -33.368
                                                    7.630
                                                           1.00
                                                                 0.00
        614
                         69
              04
                  THY
                                 -11.928 -32.711
                                                          1.00
ATOM
        615
                         69
                                                    8.263
                                                                 0.00
ATOM
              N3
                  THY
                                 -11.326 -33.657
                                                    6.293
                                                          1.00 0.00
        616
                         69
ATOM
         617
              C2
                  THY
                                 -10.458 -34.350
                                                    5.459
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          69
              02
                  THY
                                 -10.756 -34.545
ATOM
        618
                         69
                                                    4.285
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        619
              C3'
                  THY
                          69
                                  -5.964 -35.862
                                                    4.669
                                                           1.00
                                                                 0.00
         620
              C2' THY
                                  -6.964 -34.752
                                                           1.00
ATOM
                          69
                                                    5.019
                                                                 0.00
         621
              03' THY
                                  -5.819 - 36.075
                                                    3.271
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
                          69
ATOM
         622
              P
                  THY
                          70
                                  -5.072 -34.992
                                                    2.332
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         623
              OP1 THY
                          70
                                  -4.196 -34.191
                                                    3.206
                                                           1.00
                                                                  0.00
              OP2 THY
                                  -4.474 -35.677
ATOM
         624
                          70
                                                    1.164
                                                           1.00
                                                                  0.00
              05' THY
ATOM
         625
                          70
                                  -6.269 -34.033
                                                    1.839
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C5'
ATOM
                  THY
                                  -7.313 -34.503
                                                           1.00
         626
                          70
                                                    1.007
                                                                  0.00
              C4'
                  THY
ATOM
         627
                          70
                                  -8.474 -33.501
                                                    1.018
                                                           1.00
                                                                  0.00
              04'
                  THY
                                  -8.913 -33.270
ATOM
         628
                          70
                                                    2.342
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         629
              C1'
                  THY
                          70
                                  -9.665 -32.078
                                                    2.332
                                                          1.00
                                                                  0.00
ATOM
         630
              N1
                  THY
                          70
                                  -9.855 -31.530
                                                    3.698
                                                           1.00
                                                                  0.00
              60
                  THY
                                  -8.818 -31.536
ATOM
         631
                          70
                                                    4.598
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         632
              C5
                  THY
                          70
                                  -8.982 -31.050
                                                    5.854
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         633
              С7
                  THY
                          70
                                  -7.757 -31.104
                                                    6.747
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C4
                  THY
                          70
                                 -10.251 -30.509
                                                                  0.00
ATOM
         634
                                                    6.299
                                                           1.00
                          70
                                 -10.488 -30.040
ATOM
         635
              04
                  THY
                                                    7.409
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         636
             N3 THY
                          70
                                 -11.240 -30.539
                                                    5.332 1.00 0.00
```

```
457
                                                                    458
ATOM
        637
             C2 THY
                         70
                                 -11.083 -30.957
                                                    4.022 1.00 0.00
        638
             02
                  THY
                         70
ATOM
                                 -11.979 -30.779
                                                    3.201
                                                           1.00 0.00
             C3'
                  THY
                         70
ATOM
        639
                                  -8.098 -32.105
                                                    0.506
                                                           1.00 0.00
                  THY
             C2'
ATOM
        640
                         70
                                  -8.798 -31.157
                                                    1.488
                                                           1.00
                                                                 0.00
             03'
                  THY
ATOM
        641
                         70
                                  -8.532 -31.915
                                                   -0.827
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        642
             P
                  ADE
                         71
                                  -8.133 -30.589
                                                  -1.654
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP1 ADE
ATOM
        643
                         71
                                  -6.836 -30.096
                                                  -1.135
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        644
             OP2 ADE
                         71
                                  -8.298 -30.864
                                                  -3.095
                                                           1.00
                                                                 0.00
             05'
                 ADE
ATOM
        645
                         71
                                  -9.227 - 29.510
                                                  -1.202
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        646
             C5'
                  ADE
                         71
                                 -10.478 -29.344
                                                   -1.832
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        647
             C4'
                  ADE
                         71
                                 -11.102 -28.054
                                                   -1.280
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        648
             04'
                  ADE
                         71
                                 -11.521 -28.228
                                                    0.073
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  ADE
ATOM
        649
             C1'
                         71
                                 -11.118 -27.101
                                                    0.828
                                                           1.00
                                                                 0.00
             N9
                  ADE
                                 -11.012 -27.369
ATOM
        650
                         71
                                                    2.281
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  ADE
                                 -10.001 -28.035
                                                    2.917 1.00
ATOM
        651
             С8
                         71
                                                                 0.00
ATOM
        652
             N7
                  ADE
                         71
                                 -10.025 -27.979
                                                    4.213
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C5
                  ADE
ATOM
        653
                         71
                                 -11.187 -27.275
                                                    4.466
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        654
              C6
                  ADE
                         71
                                 -11.804 -26.900
                                                    5.668
                                                           1.00
                                                                 0.00
             N6
                  ADE
                         71
                                 -11.258 -27.205
                                                           1.00
ATOM
        655
                                                    6.845
                                                                 0.00
                                                    5.621
ATOM
        656
              N1
                  ADE
                         71
                                 -12.948 -26.198
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  ADE
ATOM
              C2
                         71
                                 -13.449 -25.887
                                                    4.424
                                                           1.00
                                                                 0.00
        657
ATOM
        658
              N3
                  ADE
                         71
                                 -12.957 -26.171
                                                    3.218
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C4
                  ADE
                                 -11.806 -26.889
                                                    3.304
ATOM
        659
                         71
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        660
              C3'
                  ADE
                         71
                                 -10.070 -26.905
                                                   -1.261
                                                           1.00
                                                                  0.00
             C2'
                  ADE
ATOM
        661
                         71
                                  -9.728 -26.893
                                                    0.228
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        662
              03'
                  ADE
                         71
                                 -10.680 -25.714
                                                   -1.712
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
             P
                  GUA
                         72
                                  -9.885 -24.317
                                                   -1.847
                                                                 0.00
        663
                                                           1.00
                                 -10.025 -23.810
ATOM
        664
              OP1 GUA
                         72
                                                   -3.229
                                                           1.00
                                                                  0.00
              OP2 GUA
ATOM
        665
                         72
                                  -8.546 - 24.429
                                                   -1.224
                                                           1.00
                                                                  0.00
              05'
                 GUA
                                 -10.787 -23.413
                                                   -0.887
                                                           1.00
ATOM
        666
                         72
                                                                  0.00
ATOM
              C5'
                  GUA
                         72
                                 -12.154 -23.182
                                                   -1.162
                                                           1.00
                                                                 0.00
        667
ATOM
         668
              C4'
                  GUA
                         72
                                 -12.768 -22.389
                                                   -0.009
                                                           1.00
                                                                  0.00
              04'
                  GUA
ATOM
         669
                         72
                                 -12.519 -23.085
                                                    1.206
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C1'
                  GUA
                                 -11.830 -22.250
ATOM
         670
                          72
                                                    2.114
                                                           1.00
                                                                  0.00
              N9
                  GUA
                          72
                                -10.917 -23.043
                                                    2.972
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         671
                  GUA
                          72
                                  -9.732 -23.640
ATOM
         672
              68
                                                    2.631
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              N7
                  GUA
                                  -9.115 -24.241
                                                    3.612
                                                           1.00
                                                                  0.00
         673
                          72
              C5
                  GUA
                          72
                                  -9.957 -24.019
                                                    4.696
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         674
ATOM
         675
              C6
                  GUA
                                  -9.807 -24.399
                                                    6.063
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          72
              06
                  GUA
                          72
                                  -8.880 -25.032
ATOM
         676
                                                    6.565
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         677
              N1
                  GUA
                          72
                                 -10.884 -23.999
                                                    6.848
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         678
              C2
                  GUA
                          72
                                 -12.003 -23.350
                                                    6.360
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         679
              N2
                  GUA
                          72
                                 -12.993 -23.089
                                                    7.211
                                                           1.00
                                                                  0.00
              N3
                  GUA
                                 -12.137 -22.974
ATOM
         680
                          72
                                                    5.083
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         681
              C4
                  GUA
                          72
                                 -11.081 -23.328
                                                    4.306
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         682
              C3'
                  GUA
                          72
                                 -12.139 -20.999
                                                    0.146
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C2'
                  GUA
ATOM
         683
                          72
                                 -11.075 -21.278
                                                    1.204
                                                           1.00
                                                                  0.00
              03'
                  GUA
ATOM
         684
                          72
                                 -13.141 - 20.122
                                                    0.614
                                                           1.00
                                                                  0.00
              P
                  GUA
                          73
                                 -12.928 -18.531
                                                                  0.00
ATOM
         685
                                                    0.760
                                                           1.00
              OP1 GUA
ATOM
         686
                          73
                                 -13.769 -17.844
                                                   -0.245 1.00 0.00
```

```
459
                                                                   460
                                                   0.853 1.00 0.00
ATOM
        687
             OP2 GUA
                         73
                                -11.479 -18.226
             05' GUA
                         73
                                -13.578 -18.323
                                                   2.215
                                                         1.00 0.00
ATOM
        688
ATOM
        689
             C5'
                 GUA
                         73
                                -14.944 -18.609
                                                   2.458
                                                          1.00
                                                                0.00
                 GUA
             C4'
                         73
                                -15.222 -18.643
                                                   3.964 1.00
                                                                0.00
ATOM
        690
                                                   4.582 1.00
ATOM
        691
             04'
                 GUA
                         73
                                -14.381 -19.609
                                                                0.00
        692 C1'
                 GUA
                         73
                                -13.639 -19.015
                                                   5.631 1.00
                                                                0.00
ATOM
ATOM
        693
             N9
                  GUA
                         73
                                -12.293 - 19.622
                                                   5.716
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  GUA
             68
                                -11.395 -19.822
                                                   4.701
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        694
                         73
             N7
                  GUA
                         73
                                -10.249 - 20.312
                                                          1.00
ATOM
        695
                                                   5.081
                                                                 0.00
                  GUA
ATOM
        696
             C5
                         73
                                -10.409 -20.481
                                                   6.447
                                                          1.00
                                                                 0.00
             60
                  GUA
                                                          1.00
ATOM
        697
                         73
                                 -9.510 -21.041
                                                   7.395
                                                                 0.00
             06
                  GUA
                                 -8.378 -21.466
                                                          1.00
ATOM
        698
                         73
                                                   7.174
                                                                 0.00
             N1
                  GUA
                         73
                                -10.048 -21.088
                                                   8.676
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        699
             C2
                  GUA
                         73
                                -11.314 -20.640
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        700
                                                   9.006
ATOM-
        701
             N2
                  GUA
                         73
                                -11.681 -20.686
                                                   10.288
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  GUA
ATOM
        702
             N3
                                -12.163 -20.113
                                                   8.110
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         73
                  GUA
ATOM
        703
             C4
                         73
                                -11.657 -20.070
                                                   6.850
                                                          1.00
                                                                 0.00
              C3'
        704
                 GUA
                         73
ATOM
                                -14.918 -17.303
                                                          1.00
                                                                0.00
                                                    4.644
ATOM
        705
             C2'
                  GUA
                                -13.518 -17.560
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         73
                                                   5.193
ATOM
              03'
                  GUA
                                                                 0.00
         706
                         73
                                -15.873 -17.071
                                                   5.664
                                                          1.00
ATOM
        707
             P
                  GUA
                         74
                                -15.901 -15.702
                                                   6.523
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         708
              OP1 GUA
                         74
                                 -17.311 -15.390
                                                    6.844
                                                          1.00 0.00
ATOM
         709
              OP2 GUA
                         74
                                 -15.064 -14.693
                                                    5.837
                                                           1.00
                                                                 0.00
              05'
                  GUA
ATOM
        710
                         74
                                 -15.157 -16.125
                                                   7.886
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        711
              C5'
                  GUA
                         74
                                 -15.754 -17.029
                                                    8.796
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C4'
                  GUA
ATOM
         712
                         74
                                 -14.865 -17.213
                                                   10.028
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         713
              04'
                  GUA
                         74
                                 -13.617 -17.761
                                                   9.639
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         714
              C1'
                  GUA
                         74
                                 -12.565 -17.070
                                                   10.279
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         715
              N9
                  GUA
                         74
                                 -11.336 -17.173
                                                   9.462
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         716
              68
                  GUA
                         74
                                 -11.161 -16.806
                                                    8.152
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         717
              N7
                  GUA
                         74
                                 -10.007 -17.137
                                                    7.647
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         718
              C5
                  GUA
                         74
                                  -9.355 -17.756
                                                    8.706
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         719
              6
                  GUA
                         74
                                  -8.059 - 18.344
                                                    8.759
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  GUA
ATOM
         720
              06
                         74
                                  -7.258 -18.467
                                                    7.837
                                                          1.00
                                                                 0.00
              N1
                  GUA
                         74
                                  -7.740 -18.821
                                                   10.025 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         721
              C2
                  GUA
ATOM
         722
                         74
                                  -8.589 -18.770
                                                   11.113 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         723
              N2
                  GUA
                                  -8.126 -19.195
                                                   12.290
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         74
ATOM
         724
              N3
                  GUA
                                  -9.823 -18.250
                                                   11.054
                                                           1.00
                         74
                                                                 0.00
                                                    9.829
ATOM
         725
              C4
                  GUA
                         74
                                 -10.146 -17.757
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         726
              C3'
                  GUA
                         74
                                 -14.552 -15.890
                                                   10.746
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C2'
                  GUA
ATOM
         727
                         74
                                 -13.104 -15.643
                                                   10.325
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         728
              03'
                  GUA
                         74
                                 -14.709 -16.081
                                                   12.141
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         729
              P
                  THY
                         75
                                 -14.458 -14.905
                                                   13.219
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         730
              OP1 THY
                          75
                                 -14.447 -13.604
                                                   12.513
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OP2 THY
ATOM
         731
                          75
                                 -15.377 -15.117
                                                   14.359
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         732
              05' THY
                          75
                                 -12.959 -15.225
                                                   13.707
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C5' THY
 ATOM
         733
                          75
                                 -12.671 - 16.401
                                                   14.442
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C4' THY
                         75
ATOM
         734
                                 -11.171 -16.503
                                                   14.715
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         735
              04' THY
                          75
                                 -10.459 -16.530
                                                   13.492
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         736
              C1' THY
                                  -9.222 -15.882 13.674 1.00 0.00
```

75

```
461
                                                                   462
ATOM
        737 N1
                 THY
                         75
                                 -8.635 -15.505
                                                 12.359
                                                         1.00 0.00
ATOM
        738
             C6
                 THY
                         75
                                 -9.386 -14.824
                                                  11.426
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        739
             C5
                 THY
                         75
                                 -8.902 -14.565
                                                  10.184
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        740
            C7
                 THY
                         75
                                 -9.813 -13.781
                                                   9.258
                                                          1.00
                                                                 0.00
        741 C4
                 THY
                                                   9.774
ATOM
                         75
                                 -7.587 - 15.013
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        742 04
                 THY
                         75
                                 -7.085 -14.885
                                                   8.660
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        743
             N3
                 THY
                         75
                                 -6.885 -15.655
                                                  10.776
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        744
             C2
                 THY
                         75
                                 -7.337 -15.919
                                                  12.059
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        745
             02
                 THY
                         75
                                                  12.860
                                 -6.600 - 16.489
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        746
             C3'
                 THY
                         75
                                 -10.612 -15.308
                                                  15.508
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        747
             C2'
                 THY
                                 -9.651 -14.673
                                                  14.500
                         75
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        748
             03'
                 THY
                         75
                                 -9.967 -15.800
                                                  16.670
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        749 P
                  THY
                         76
                                 -9.245 -14.834
                                                  17.745
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        750
             OP1 THY
                                 -9.581 -13.425
                                                  17.438
                         76
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                 -9.489 -15.375
             OP2 THY
ATOM
        751
                         76
                                                  19.100
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        752
             05'
                 THY
                                 -7.697 -15.068
                                                  17.380
                         76
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        753
             C5'
                 THY
                         76
                                 -7.088 -16.330
                                                  17.576
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        754
             C4'
                 THY
                         76
                                 -5.627 -16.284
                                                  17.124
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        755
             04'
                 THY
                         76
                                 -5.574 -15.934
                                                  15.752
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 THY
ATOM
        756
             C1'
                         76
                                 -4.588 -14.946
                                                  15.561
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        757
             N1
                  THY
                         76
                                 -4.841 -14.219
                                                  14.283
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
        758
             60
                         76
                                 -5.953 -13.424
                                                  14.121
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C5
                 THY
ATOM
        759
                         76
                                 -6.233 -12.836
                                                  12.928
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        760
             C7
                  THY
                                 -7.481 -11.975
                                                  12.889
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         76
                  THY
ATOM
        761
             C4
                         76
                                 -5.387 -13.028
                                                  11.767
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             04
                  THY
                                 -5.581 -12.572
                                                  10.642
        762
                         76
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 THY
ATOM
        763
             N3
                         76
                                 -4.291 -13.832
                                                 12.013
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             C2
                 THY
                         76
                                  -3.989 -14.466
                                                  13.205
                                                          1.00
                                                                 0.00
        764
ATOM
        765
             02
                  THY
                         76
                                 -3.015 -15.216
                                                  13.264
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        766
             C3'
                  THY
                         76
                                  -4.812 -15.218
                                                  17.877
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C2'
                 THY
                                                  16.833
ATOM
        767
                         76
                                  -4.724 -14.105
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        768
             03'
                 THY
                         76
                                  -3.532 -15.745
                                                  18.185
                                                           1.00
                                                                 0.00
             P
ATOM
        769
                  ADE
                         77
                                  -2.614 -15.133
                                                  19.365
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        770
             OP1 ADE
                         77
                                  -2.695 -16.029
                                                  20.541
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP2 ADE
ATOM
        771
                         77
                                  -2.912 -13.692
                                                  19.507
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        772
             05'
                 ADE
                         77
                                  -1.142 -15.266
                                                  18.732
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        773
             C5'
                  ADE
                                  -0.509 -16.520
                                                  18.607
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         77
ATOM
        774
             C4'
                  ADE
                         77
                                   0.667 - 16.416
                                                  17.633
                                                          1.00
                                                                 0.00
        775
             04'
                  ADE
                                   0.205 - 15.859
                                                  16.418
ATOM
                         77
                                                          1.00
                                                                 0.00
        776
             C1'
                  ADE
                         77
                                   0.918 -14.684
                                                  16.078
                                                                 0.00
ATOM
                                                          1.00
ATOM
              N9
                  ADE
        777
                         77
                                  -0.027 -13.747
                                                  15.431
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
                  ADE
                                                  15.963
        778
              68
                         77
                                  -1.174 -13.210
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        779
              N7
                  ADE
                                  -1.893 -12.525
                         77
                                                  15.120
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C5
                  ADE
ATOM
        780
                         77
                                  -1.159 -12.599
                                                  13.944
                                                           1.00
                                                                 0.00
              60
                  ADE
                                  -1.373 -12.058
ATOM
         781
                         77
                                                  12.664
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        782
              N6
                  ADE
                         77
                                  -2.437 -11.297
                                                  12.411
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        783
              N1
                  ADE
                                  -0.459 -12.279
                                                  11.699
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         77
ATOM
         784
              C2
                  ADE
                         77
                                   0.604 - 13.027
                                                  11.999
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         785
              N3
                  ADE
                          77
                                   0.905 - 13.620
                                                  13.154
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
                  ADE
                                  -0.022 -13.344 14.113 1.00
         786
             C4
                          77
                                                                 0.00
```

463 464 ATOM 787 C3' ADE 77 1.814 -15.509 18.091 1.00 0.00 77 17.411 1.00 0.00 ATOM 788 C2' ADE 1.470 -14.184 ATOM 789 03' ADE 77 3.003 -16.092 17.588 1.00 0.00 ATOM 790 P GUA 78 4.468 -15.686 18.112 1.00 0.00ATOM 791 0P1 GUA 78 5.378 -16.785 17.702 1.00 0.00 792 OP2 GUA 78 4.369 -15.308 19.539 1.00 0.00 ATOM ATOM 793 05' GUA 78 4.836 -14.382 17.246 1.00 0.00 ATOM 794 C5' GUA 78 5.538 - 14.52616.030 1.00 0.00 GUA ATOM 795 C4' 78 5.363 -13.334 15.092 1.00 0.00 04' **GUA** 1.00 0.00 ATOM 796 78 4.022 -12.916 14.961 **GUA** 4.072 -11.630 14.383 ATOM 797 C1' 78 1.00 0.00 N9 GUA 2.754 - 10.95714.477 1.00 ATOM 798 78 0.0068 **GUA** 1.956 -10.809 15.581 1.00 ATOM 799 78 0.00N7 GUA 78 0.825 - 10.20115.348 1.00 0.00 ATOM 800 GUA 78 0.878 -9.906 13.989 1.00 0.00 ATOM 801 C5 GUA 6 78 -9.232 13.152 1.00 0.00 ATOM 802 -0.067 GUA -8.756ATOM 803 06 78 -1.15913.457 1.00 0.00 GUA -9.144 804 N1 78 0.364 11.834 1.00 0.00 ATOM C2GUA -9.65311.364 1.00 0.00 ATOM 805 78 1.556 -9.492 806 N2 GUA 78 1.823 10.066 1.00 0.00 ATOM N3 GUA 2.445 -10.283 12.145 1.00 0.00 807 78 ATOM GUA 2.052 -10.373 13.445 0.00 ATOM 808 C4 78 1.00 C3' GUA 6.149 -12.091 15.524 0.00 ATOM 809 78 1.00 C2' GUA 78 5.136 -10.965 15.255 1.00 0.00 ATOM 810 03' GUA 14.739 ATOM 811 78 7.335 - 12.0731.00 0.00 P GUA 8.454 -10.911 14.826 1.00 0.00 ATOM 812 79 OP1 GUA 9.722 -11.439 14.264 1.00 0.00 ATOM 813 79 **ATOM** OP2 GUA 8.433 -10.322 16.181 1.00 0.00 814 79 **ATOM** 815 05' GUA 79 7.859 -9.839 13.785 1.00 0.00 C5' GUA 7.720 -10.164 12.415 ATOM 816 79 1.00 0.00 ATOM 817 C4' GUA 79 6.868 -9.118 11.697 1.00 0.00 **ATOM** 818 04' GUA 5.578 -9.02712.279 1.00 0.00 79 ATOM 819 C1' GUA 79 5.118 -7.707 12.103 1.00 0.00 N9 GUA -7.405ATOM 820 79 3.986 13.007 1.00 0.00 ATOM 821 **C8 GUA** 79 3.894 -7.60414.361 1.00 0.00 ATOM 822 N7 GUA 79 2.754 -7.24214.879 1.00 0.00 GUA -6.74613.795 1.00 0.00 ATOM 823 C5 79 2.038 C6 GUA -6.191 13.729 1.00 0.00 ATOM 824 79 0.723 06 GUA 79 -0.095-6.04814.636 1.00 0.00 ATOM 825 -5.786**ATOM** 826 N1 GUA 0.383 12.444 1.00 0.00 79 C2GUA 1.202 -5.910 1.00 0.00 ATOM 827 79 11.343 ATOM 828 N2GUA 79 0.768 -5.39710.191 1.00 0.00 -6.44511.397 **ATOM** 829 N3 GUA 79 2.427 1.00 0.00 -6.838ATOM 830 C4GUA 79 2.787 12.647 1.00 0.00 C3' GUA 7.457 -7.69811.752 1.00 0.00 ATOM 831 79 ATOM 832 C2' GUA 79 6.364 -6.92112.489 1.00 0.00 ATOM 833 03' GUA 79 7.672 -7.26410.420 1.00 0.00 -5.821 834 P **GUA** 80 8.298 10.059 1.00 0.00 ATOM ATOM OP1 GUA 8.979 -5.283 11.257 1.00 0.00 835 80 ATOM 836 OP2 GUA 80 9.040 - 5.9488.785 1.00 0.00

```
465
                                                                    466
ATOM
        837
             05' GUA
                         80
                                   6.974 -4.942
                                                          1.00 0.00
                                                    9.789
ATOM
        838
             C5'
                  GUA
                         80
                                   6.142
                                          -5.203
                                                    8.673
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        839
             C4'
                  GUA
                         80
                                   4.946
                                          -4.246
                                                    8.655
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        840
             04'
                  GUA
                         80
                                   4.157
                                          -4.432
                                                    9.818
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C1'
                  GUA
                                   3.699
                                          -3.174
                                                   10.260
ATOM
        841
                         80
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        842 N9
                  GUA
                         80
                                   3.263
                                          -3.228
                                                  11.674
                                                           1.00
                                                                  0.00
             C8
                  GUA
                                          -3.673
ATOM
        843
                         80
                                   3.964
                                                  12.766
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        844
             N7
                  GUA
                         80
                                   3.284
                                          -3.656
                                                   13.879
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  GUA
                                                           1.00
ATOM
        845
             C5
                         80
                                   2.039
                                          -3.166
                                                  13.503
                                                                  0.00
             C6
                  GUA
                                          -2.980
ATOM
        846
                         80
                                   0.850
                                                  14.274
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                         -3.212
ATOM
        847
             06
                  GUA
                         80
                                   0.674
                                                  15.467
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        848
             N1
                  GUA
                         80
                                  -0.209
                                          -2.505
                                                   13.511
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        849
             C2
                  GUA
                         80
                                  -0.146
                                          -2.239
                                                  12.160
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        850
             N2
                  GUA
                         80
                                  -1.252
                                         -1.779
                                                  11.572
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        851
             N3
                  GUA
                         80
                                   0.964
                                          -2.423
                                                   11.429
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        852
             C4
                  GUA
                         80
                                   2.017
                                          -2.893
                                                   12.155
                                                           1.00
                                                                  0.00
             C3'
                  GUA
ATOM
        853
                         80
                                   5.356
                                          -2.763
                                                    8.667
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C2'
                  GUA
ATOM
        854
                         80
                                   4.950
                                          -2.321
                                                   10.069
                                                           1.00
                                                                  0.00
              03'
                  GUA
                                          -2.036
ATOM
        855
                         80
                                   4.610
                                                    7.713
                                                           1.00
                                                                  0.00
              05'
                  CYT
                                          -1.368
                                                   16.752
ATOM
        856
                         81
                                  -9.323
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        857
              C5'
                  CYT
                         81
                                  -9.139
                                          -0.288
                                                   15.860
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C4'
                  CYT
                                  -8.055
                                          -0.594
ATOM
        858
                         81
                                                   14.819
                                                           1.00
                                                                  0.00
              04'
                 CYT
                                  -6.825
                                          -0.922
ATOM
        859
                         81
                                                   15.432
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C1'
                  CYT
                                  -6.029
                                          -1.539
ATOM
        860
                         81
                                                   14.444
                                                           1.00
                                                                  0.00
              N1
                  CYT
                                  -4.890
                                          -2.285
                                                   15.036
ATOM
        861
                         81
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        862
              6
                  CYT
                         81
                                  -5.087
                                          -3.066
                                                   16.145
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C5
                  CYT
                                  -4.094
                                          -3.820
                                                   16.665
                                                                  0.00
ATOM
        863
                         81
                                                           1.00
ATOM
              C4
                  CYT
                                  -2.815
                                          -3.751
                                                   16.017
                                                           1.00
                                                                  0.00
        864
                         81
                  CYT
ATOM
        865
              N4
                                  -1.783
                                          -4.460
                                                   16.475
                                                           1.00
                                                                  0.00
                         81
              N3
                  CYT
                                  -2.636
                                          -3.004
                                                   14.919
                                                           1.00
ATOM
        866
                         81
                                                                  0.00
              C2
                 CYT
                                  -3.655
                                          -2.275
                                                   14.386
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        867
                         81
ATOM
        868
              02
                  CYT
                                  -3.470
                                          -1.639
                                                   13.351
                                                           1.00
                                                                  0.00
                         81
ATOM
              C3' CYT
                                  -8.365
                                                                  0.00
        869
                         81
                                          -1.795 13.912
                                                           1.00
ATOM
        870
              C2' CYT
                          81
                                  -7.015 -2.505
                                                  13.807
                                                           1.00
                                                                  0.00
              03' CYT
                                          -1.329
ATOM
        871
                          81
                                  -8.861
                                                   12.668
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         872
              P
                  CYT
                          82
                                  -9.276
                                          -2.327
                                                   11.465
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         873
              OP1 CYT
                                 -10.295
                                          -1.645
                                                   10.639
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          82
ATOM
         874
              OP2 CYT
                          82
                                  -9.568
                                           -3.655
                                                   12.049
                                                            1.00
                                                                  0.00
              05' CYT
ATOM
         875
                          82
                                  -7.917
                                           -2.451
                                                   10.599
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C5' CYT
                                  -7.384
                                           -1.340
ATOM
         876
                          82
                                                    9.900
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C4'
                  CYT
                                  -6.088
                                           -1.717
ATOM
         877
                          82
                                                    9.170
                                                            1.00
                                                                  0.00
                  CYT
ATOM
         878
              04'
                          82
                                  -5.115
                                           -2.155
                                                   10.097
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C1'
                  CYT
                                          -3.284
         879
                                  -4.427
                                                    9.594
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
                          82
                  CYT
              N1
ATOM
         880
                          82
                                  -4.032
                                          -4.118
                                                   10.750
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         881
              60
                  CYT
                          82
                                  -4.984
                                           -4.453
                                                   11.672
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C5
                  CYT
ATOM
         882
                          82
                                  -4.693
                                          -5.159
                                                   12.778
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C4
                  CYT
                                  -3.321
                                           -5.545
                                                   12.957
ATOM
         883
                          82
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
              N4
                  CYT
                          82
                                  -2.954
                                           -6.265
         884
                                                   14.018
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
              N3
                  CYT
                          82
                                  -2.393
                                           -5.238
                                                   12.038
         885
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         886
              C2 CYT
                          82
                                  -2.715 -4.542 10.910 1.00 0.00
```

```
467
                                                                   468
ATOM
        887
             02 CYT
                         82
                                 -1.859 -4.313 10.058 1.00 0.00
ATOM
        888
             C3'
                 CYT
                         82
                                 -6.274
                                         -2.858
                                                   8.159
                                                          1.00
                                                                0.00
             C2'
                 CYT
                                 -5.486 -4.011
                                                          1.00
ATOM
        889
                         82
                                                   8.769
                                                                0.00
             03'
                 CYT
                                 -5.775 -2.423
                                                   6.903
ATOM
        890
                         82
                                                          1.00
                                                                 0.00
        891
             P
                 CYT
                                 -5.903
                                         -3.303
ATOM
                         83
                                                   5.557
                                                          1.00
                                                                0.00
             OP1 CYT
                                 -7.045
                                        -4.230
ATOM
        892
                         83
                                                   5.712
                                                         1.00
                                                                 0.00
                                         -2.382
ATOM
        893
             OP2 CYT
                         83
                                 -5.853
                                                   4.399
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        894
             05' CYT
                                 -4.545 -4.169
                                                          1.00
                         83
                                                   5.571
                                                                 0.00
ATOM
        895
             C5'
                 CYT
                                 -3.302 -3.616
                         83
                                                   5.170
                                                          1.00
                                                                0.00
        896
             C4' CYT
                                 -2.180 -4.637
ATOM
                         83
                                                   5.396
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        897
             04'
                 CYT
                                 -2.158
                                         -5.016
                         83
                                                   6.755
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        898
             C1'
                  CYT
                         83
                                 -1.504
                                         -6.260
                                                   6.885
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        899
             N1
                  CYT
                                 -2.049
                                         -6.973
                                                   8.066
                                                          1.00
                         83
                                                                 0.00
ATOM
        900
             С6
                 CYT
                         83
                                 -3.398
                                         -6.945
                                                   8.301
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        901
             C5
                  CYT
                                 -3.929
                                         -7.402
                                                   9.456
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         83
ATOM
        902
             C4
                  CYT
                         83
                                 -3.010 - 7.948
                                                  10.415
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        903
             N4
                  CYT
                         83
                                 -3.443 - 8.378
                                                  11.600
                                                          1.00
                                                                0.00
                  CYT
ATOM
        904
             N3
                         83
                                 -1.704 -8.068
                                                   10.136
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C2
                  CYT
                                         -7.616
ATOM
        905
                         83
                                 -1.191
                                                   8.955
                                                          1.00
                                                                 0.00
             02
                  CYT
                                 -0.005 -7.799
ATOM
        906
                         83
                                                   8.688
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C3'
                 CYT
ATOM
        907
                                 -2.401 -5.948
                                                          1.00
                         83
                                                   4.634
                                                                0.00
             C2' CYT
ATOM
        908
                         83
                                  -1.864 -7.005
                                                   5.602
                                                          1.00
                                                                0.00
             03'
                 CYT
                                 -1.718
                                         -5.945
ATOM
        909
                                                   3.390
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         83
             P
ATOM
        910
                  THY
                                  -1.882 -7.146
                         84
                                                   2.314
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OP1 THY
ATOM
        911
                         84
                                  -1.343
                                         -6.678
                                                   1.018
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OP2 THY
                                         -7.653
ATOM
        912
                                  -3.271
                                                   2.391
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         84
             05' THY
                                  -0.904 -8.301
ATOM
        913
                                                   2.872
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         84
ATOM
             C5'
                 THY
                                         -8.138
        914
                                   0.501
                                                   2.871
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         84
ATOM
        915
             C4'
                  THY
                                  1.167 -9.282
                                                   3.642
                                                          1.00
                         84
                                                                 0.00
                 THY
                                   0.649 - 9.342
ATOM
        916
              04'
                         84
                                                   4.960
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        917
              C1'
                 THY
                         84
                                   0.632 -10.678
                                                   5.405
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              N1
                  THY
                                  -0.332 -10.819
                                                           1.00
        918
                         84
                                                   6.540
                                                                 0.00
ATOM
        919
              C6
                  THY
                         84
                                  -1.653 -10.472
                                                   6.365
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        920
              C5
                  THY
                                  -2.545 -10.557
                                                   7.383
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         84
ATOM
         921
              C7
                  THY
                         84
                                  -3.989 -10.223
                                                   7.051
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         922
              C4
                  THY
                         84
                                  -2.144 -10.976
                                                   8.706
                                                           1.00
                                                                 0.00
              04
                  THY
ATOM
         923
                         84
                                  -2.892 -11.050
                                                   9.673
                                                           1.00
                                                                 0.00
              N3
                  THY
ATOM
        924
                                  -0.806 -11.322
                                                   8.817
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         84
         925
              C2
                  THY
                                   0.130 -11.260
ATOM
                         84
                                                   7.786
                                                          1.00
                                                                 0.00
              02
ATOM
         926
                  THY
                                   1.296 -11.587
                                                   7.994
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         84
              C3'
                  THY
ATOM
         927
                         84
                                   0.925 - 10.666
                                                   3.016
                                                          1.00
                                                                 0.00
              C2'
                                   0.185 -11.408
ATOM
         928
                 THY
                                                    4.136
                                                          -1.00
                                                                 0.00
                         84
              03' THY
ATOM
         929
                                   2.178 -11.234
                                                   2.673 1.00
                                                                 0.00
                         84
              P
                  ADE
                                   2.333 -12.704
ATOM
         930
                         85
                                                    2.016
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              OP1 ADE
                                   3.615 -12.759
                                                           1.00
         931
                         85
                                                   1.281
                                                                 0.00
ATOM
         932
              OP2 ADE
                                   1.071 -13.067
                                                    1.334
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         85
ATOM
         933
              05' ADE
                         85
                                   2.475 -13.630
                                                    3.319
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C5'
ATOM
         934
                  ADE
                         85
                                   3.532 -13.430
                                                    4.235
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C4'
                  ADE
ATOM
         935
                                   3.246 - 14.226
                                                          1.00
                         85
                                                   5.505
                                                                 0.00
ATOM
         936
              04' ADE
                         85
                                   1.987 - 13.845
                                                   6.031 1.00 0.00
```

	400				(230)			付用とし
	469							470
ATOM	937	C1'	ADE	85	1.351 -14.976	6.578	1.00	0.00
ATOM	938	N9	ADE	85	-0.106 -14.719	6.656	1.00	0.00
ATOM	939	C8	ADE	85	-0.974 -14.398	5.640	1.00	0.00
ATOM	940	N7	ADE	85	-2.172 -14.070	6.036	1.00	0.00
ATOM	941	C5	ADE	85	-2.102 -14.204	7.416	1.00	0.00
ATOM	942	C6	ADE	85	-3.038 -13.992	8.446	1.00	0.00
ATOM	943	N6	ADE	85	-4.276 -13.545	8.228	1.00	0.00
ATOM	944	N1	ADE	85	-2.656 -14.229	9.710	1.00	0.00
ATOM	945	C2	ADE	85	-1.416 -14.637	9.946	1.00	0.00
ATOM	946	N3	ADE	85	-0.439 -14.866	9.078	1.00	0.00
ATOM	947	C4	ADE	85	-0.853 -14.621	7.805	1.00	0.00
ATOM	948	C3'	ADE	85	3.171 -15.736	5.248	1.00	0.00
ATOM	949	C2'	ADE	85	1.703 -16.048	5.552	1.00	0.00
ATOM	950	03'	ADE	85	4.101 -16.370	6.106	1.00	0.00
ATOM	951	P	ADE	86	4.256 -17.968	6.178	1.00	0.00
ATOM	952		ADE	86	5.649 -18.304	6.559	1.00	0.00
ATOM	953		ADE	86	3.658 -18.551	4.959	1.00	0.00
ATOM	954	05'	ADE	86	3.302 -18.319	7.416	1.00	0.00
ATOM	955	C5'	ADE	86	3.616 -17.836	8.701	1.00	0.00
ATOM	956	C4'	ADE	86	2.593 -18.306	9.727	1.00	0.00
ATOM	957	04'	ADE	86	1.320 -17.722	9.507	1.00	0.00
ATOM	958	C1'	ADE	86	0.317 -18.712	9.611	1.00	0.00
ATOM	959	N9	ADE	86	-0.867 -18.283	8.832	1.00	0.00
ATOM	960	C8	ADE	86	-0.972 -18.121	7.474	1.00	0.00
ATOM	961	N7	ADE	86	-2.120 -17.651	7.072	1.00	0.00
ATOM	962	C5	ADE	86	-2.832 -17.481		1.00	0.00
	963	C6	ADE	86			1.00	0.00
ATOM					-4.125 -16.994	8.539		
ATOM	964	N6	ADE	86 ec	-4.962 -16.551	7.597	1.00	0.00
ATOM	965	N1	ADE	86 ec	-4.516 -16.921	9.823	1.00	0.00
ATOM	966	C2	ADE	86 86	-3.680 -17.313	10.777	1.00	0.00
ATOM	967	N3	ADE	86	-2.441 -17.776	10.645	1.00	0.00
ATOM	968	C4	ADE	86	-2.071 -17.847	9.336	1.00	0.00
ATOM	969	C3'	ADE	86	2.379 -19.823		1.00	0.00
ATOM	970	C2'	ADE	86	1.013 -19.949	9.054	1.00	0.00
ATOM	971	03'	ADE	86	2.403 -20.230	11.088	1.00	0.00
ATOM	972	P	CYT	87	2.221 -21.762	11.523	1.00	0.00
ATOM	973		CYT	87	3.125 -22.035	12.658	1.00	0.00
ATOM	974		CYT	87	2.297 -22.597	10.304	1.00	0.00
ATOM	975	05'		87	0.722 -21.737	12.094	1.00	0.00
ATOM	976	C5'	CYT	87	0.462 -21.065	13.315	1.00	0.00
ATOM	977	C4'	CYT	87	-1.027 -21.026	13.638	1.00	0.00
ATOM	978	04'	CYT	87	-1.731 -20.425	12.570	1.00	0.00
ATOM	979	C1'		87	-2.963 -21.089	12.407	1.00	0.00
ATOM	980	N1	CYT	87	-3.472 -20.867	11.031	1.00	0.00
ATOM	981	C6	CYT	87	-2.658 -21.092	9.947	1.00	0.00
ATOM	982	C5	CYT		-3.078 -20.846	8.685	1.00	0.00
ATOM	983	C4	CYT		-4.418 -20.365	8.526	1.00	0.00
ATOM	984	N4	CYT		-4.891 -20.045	7.321	1.00	
ATOM	985	N3	CYT		-5.193 -20.112	9.588	1.00	0.00
ATOM	986	C2	CYT	87	-4.754 -20.352	10.853	1.00	0.00

```
471
                                                                   472
ATOM
        987
             02
                 CYT
                         87
                                 -5.490 -20.101 11.804 1.00 0.00
ATOM
        988
             C3' CYT
                         87
                                 -1.646 -22.418
                                                 13.840
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        989
             C2'
                 CYT
                         87
                                 -2.571 -22.545
                                                  12.636
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        990
             03'
                 CYT
                         87
                                 -2.317 -22.418
                                                 15.087
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        991
             P
                 CYT
                         88
                                 -3.072 -23.714
                                                 15.673
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        992
             OP1 CYT
                         88
                                 -2.747 -23.782
                                                 17.117
                                                          1.00
                                                                0.00
             OP2 CYT
ATOM
        993
                         88
                                 -2.780 -24.873
                                                  14.801
                                                          1.00
                                                                0.00
             05' CYT
ATOM
        994
                         88
                                 -4.616 -23.301
                                                  15.493
                                                          1.00
                                                                0.00
             C5' CYT
ATOM
        995
                         88
                                 -5.183 -22.245
                                                  16.250
                                                          1.00
                                                                0.00
             C4' CYT
ATOM
        996
                         88
                                 -6.648 -22.023
                                                  15.863
                                                          1.00
                                                                0.00
        997
             04' CYT
                                 -6.739 -21.678
ATOM
                         88
                                                  14.494
                                                          1.00
                                                                0.00
             C1'
                 CYT
                                 -7.837 -22.332
                                                                0.00
ATOM
        998
                         88
                                                  13.892
                                                          1.00
ATOM
             N1
                 CYT
                                 -7.491 -22.595
                                                  12.476
                                                          1.00
                                                                0.00
        999
                         88
       1000
                 CYT
             С6
                         88
                                 -6.274 -23.152
                                                  12.186
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
ATOM
       1001
             C5
                  CYT
                                 -5.859 -23.348
                                                  10.919
                                                                0.00
                         88
                                                          1.00
                  CYT
             C4
                                 -6.768 - 22.949
                                                                 0.00
ATOM
       1002
                         88
                                                   9.880
                                                          1.00
                  CYT
ATOM
       1003
             N4
                                 -6.450 -23.088
                                                   8.596
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         88
             N3
                 CYT
                         88
                                 -7.972 -22.435
                                                  10.168
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1004
             C2
                  CYT
                                 -8.373 -22.252
                                                                 0.00
ATOM
       1005
                                                  11.456
                                                          1.00
                         88
                 CYT
ATOM
        1006
             02
                         88 ...
                                 -9.494 -21.807
                                                  11.687
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1007
             C3' CYT
                                 -7.507 -23.279
                                                  16.060
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         88
             C2' CYT
        1008
                                 -7.928 -23.652
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         88
                                                  14.647
ATOM
        1009
             03' CYT
                                 -8.593 -22.955
                                                  16.914
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         88
        1010 P
                  CYT
ATOM
                         89
                                 -9.744 -24.016
                                                  17.315
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1011 OP1 CYT
                                -10.300 -23.623
                         89
                                                  18.628
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1012 OP2 CYT
                         89
                                 -9.213 -25.384
                                                  17.119
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1013 05' CYT
                         89
                                -10.868 -23.746
                                                  16.189
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1014
             C5' CYT
                         89
                                -11.599 -22.532
                                                  16.153
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1015
             C4'
                  CYT
                         89
                                -12.525 -22.504
                                                  14.932
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1016 04' CYT
                         89
                                -11.763 -22.685
                                                  13.756
                                                                 0.00
                                                          1.00
ATOM
        1017
             C1' CYT
                         89
                                -12.530 -23.364
                                                  12.784
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1018
             N1
                  CYT
                         89
                                -11.604 -24.096
                                                  11.882
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1019
             6
                  CYT
                         89
                                -10.556 - 24.794
                                                  12.421
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1020
              C5
                  CYT
                                 -9.583 -25.325
                                                                 0.00
                         89
                                                  11.652
                                                          1.00
              C4 CYT
ATOM
        1021
                         89
                                 -9.712 -25.149
                                                  10.233
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1022
             N4
                 CYT
                                 -8.768 -25.621
                                                   9.416
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         89
              N3
ATOM
        1023
                 CYT
                         89
                                -10.774 -24.524
                                                   9.702
                                                          1.00
                                                                 0.00
              C2 CYT
                                 -11.749 -23.997
ATOM
        1024
                         89
                                                  10.503
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                  10.008
ATOM
        1025
              02 CYT
                         89
                                 -12.741 -23.470
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1026
             C3' CYT
                                -13.568 -23.632
                                                  14.944
                                                                 0.00
                         89
                                                          1.00
ATOM
        1027
              C2'
                  CYT
                                 -13.354 -24.342
                                                                 0.00
                         89
                                                  13.610
                                                          1.00
ATOM
        1028
              03'
                  CYT
                         89
                                 -14.868 -23.079
                                                  15.079
                                                          1.00
                                                                 0.00
        1029
              P
                  THY
                                 -16.211 -23.982 15.123
ATOM
                         90
                                                          1.00
                                                                 0.00
        1030
              OP1 THY
                                 -17.186 -23.317
                                                  16.015
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         90
ATOM
        1031
              OP2 THY
                         90
                                 -15.827 -25.390
                                                  15.371
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1032
              05' THY
                         90
                                 -16.763 -23.880
                                                  13.610
                                                          1.00
                                                                 0.00
              C5'
ATOM
        1033
                  THY
                         90
                                 -17.244 - 22.656
                                                  13.087
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C4' THY
        1034
                         90
                                 -17.601 -22.805
                                                                 0.00
ATOM
                                                  11.603
                                                          1.00
ATOM
        1035
              04' THY
                                 -16.471 -23.298
                         90
                                                  10.908
                                                          1.00
                                                                 0.00
        1036 C1' THY
ATOM
                         90
                                 -16.856 -24.305
                                                   9.998 1.00 0.00
```

	473				(=55)				474
ATOM	1037	N1	THY	90	-15 700	-25.224	9.806	1.00	0.00
ATOM	1038	C6	THY	90	-15.190		10.887	1.00	0.00
ATOM	1039	C5	THY	90	-14.070		10.786	1.00	0.00
ATOM	1040	C7	THY	90	-13.633		12.033	1.00	0.00
ATOM	1040	C4	THY	90	-13.335		9.546	1.00	
									0.00
ATOM	1042	04	THY	90		-27.342	9.410	1.00	0.00
ATOM	1043	N3	THY	90	-13.921		8.481	1.00	0.00
ATOM	1044	C2	THY	90		-25.317		1.00	0.00
ATOM	1045	02	THY	90		-24.782		1.00	0.00
ATOM	1046	C3'	THY	90		-23.793	11.344	1.00	0.00
ATOM	1047	C2'	THY	90		-24.981	10.701	1.00	0.00
ATOM	1048	03'	THY	90		-23.190	10.484	1.00	0.00
ATOM	1049	P	ADE	91		-23.893	10.126	1.00	0.00
ATOM	1050		ADE	91		-24.767	11.254	1.00	0.00
ATOM	1051		ADE	91		-22.846	9.651	1.00	0.00
ATOM	1052	05'	ADE	91		-24.829	8.875	1.00	0.00
ATOM	1053	C5'	ADE	91		-24.276	7.598	1.00	0.00
ATOM	1054	C4'	ADE	91		-25.319	6.670	1.00	0.00
ATOM	1055	04'	ADE	91		-25.772		1.00	0.00
ATOM	1056	C1'	ADE	91		-26.948	6.454	1.00	0.00
ATOM	1057	N9	ADE	91	-17.231	-27.696	7.133	1.00	0.00
ATOM	1058	С8	ADE	91		-28.006	8.463	1.00	0.00
ATOM	1059	N7	ADE	91	-16.029	-28.617		1.00	0.00
ATOM	1060	C5	ADE	91	-15.361	-28.751	7.577	1.00	0.00
ATOM	1061	C6	ADE	91	-14.120	-29.309	7.214	1.00	0.00
ATOM	1062	N6	ADE	91	-13.273	-29.825	8.107	1.00	0.00
ATOM	1063	N1	ADE	91	-13.781	-29.334	5.912	1.00	0.00
ATOM	1064	C2	ADE	91	-14.616	-28.815	5.015	1.00	0.00
ATOM:	1065	N3	ADE	91	-15.785	-28.223	5.229	1.00	0.00
ATOM	1066	C4	ADE	91	-16.106	-28.224	6.552	1.00	0.00
ATOM	1067	C3'	ADE	91	-20.680	-26.599	6.490	1.00	0.00
ATOM	1068	C2'	ADE	91	-19.621	-27.708	6.524	1.00	0.00
ATOM	1069	03'	ADE	91	-21.387	-26.506	5.264	1.00	0.00
ATOM	1070	P	ADE	92	-22.310	-27.697	4.682	1.00	0.00
ATOM	1071	0P1	ADE	92	-22.793	-28.519	5.814	1.00	0.00
ATOM	1072	0P2	ADE	92	-23.280	-27.108	3.732	1.00	0.00
ATOM	1073	05'	ADE	92	-21.254	-28.574	3.836	1.00	0.00
ATOM	1074	C5'	ADE	92	-20.578	-28.030	2.717	1.00	0.00
ATOM	1075	C4'	ADE	92	-19.490	-28.992	2.231	1.00	0.00
ATOM	1076	04'	ADE	92	-18.550	-29.239	3.265	1.00	0.00
ATOM	1077	C1'	ADE	92	-18.136	-30.585	3.186	1.00	0.00
ATOM	1078	N9	ADE	92	-17.540	-31.028	4.466	1.00	0.00
ATOM	1079	C8	ADE	92	-18.076	-30.946	5.726	1.00	0.00
ATOM	1080	N7	ADE	92	-17.294	-31.375	6.677	1.00	0.00
ATOM	1081	C5	ADE	92	-16.156	-31.783	5.995	1.00	0.00
ATOM	1082	C6	ADE	92	-14.940	-32.349	6.424	1.00	0.00
ATOM	1083	N6	ADE	92	-14.689	-32.571	7.714	1.00	0.00
ATOM	1084	N1	ADE	92	-14.010	-32.671	5.504	1.00	0.00
ATOM	1085	C2	ADE	92	-14.283	-32.439	4.222	1.00	0.00
ATOM	1086	N3	ADE	92	-15.382	-31.910	3.690	1.00	0.00

```
(239)
                                                             特開2003-135087
       475
ATOM
       1087 C4 ADE
                        92
                               -16.297 -31.593
                                                 4.645 1.00 0.00
                               -20.044 -30.367
ATOM
       1088 C3'
                ADE
                        92
                                                 1.819 1.00 0.00
ATOM
       1089 C2'
                ADE
                        92
                               -19.468 -31.276
                                                 2.908
                                                       1.00
                                                             0.00
       1090 03'
                               -19.566 -30.680
ATOM
                ADE
                        92
                                                 0.521
                                                       1.00
                                                             0.00
ATOM
       1091
            P
                 CYT
                        93
                               -20.068 -31.978
                                                -0.297
                                                       1.00
                                                             0.00
       1092 OP1 CYT
                               -20.203 -31.606
ATOM
                        93
                                                -1.723
                                                       1.00
                                                              0.00
            OP2 CYT
                               -21.213 -32.583
ATOM
       1093
                        93
                                                 0.418
                                                        1.00
                                                              0.00
            05' CYT
                               -18.815 -32.976
ATOM
       1094
                        93
                                                -0.154
                                                       1.00
                                                              0.00
            C5' CYT
                               -17.628 -32.779
                                                -0.901
ATOM
       1095
                        93
                                                       1.00
                                                              0.00
            C4' CYT
                               -16.595 -33.834
                                                -0.499
ATOM
       1096
                        93
                                                       1.00
                                                              0.00
            04' CYT
                               -16.355 -33.731
ATOM
       1097
                        93
                                                 0.885
                                                       1.00
                                                              0.00
            C1' CYT
                               -15.957 -34.987
                                                 1.382
ATOM
       1098
                        93
                                                       1.00
                                                              0.00
             N1
                 CYT
                               -16.255 -35.035
ATOM
       1099
                        93
                                                 2.836 1.00
                                                              0.00
                               -17.454 -34.561
ATOM
       1100
            C6
                 CYT
                        93
                                                 3.304
                                                       1.00
                                                              0.00
ATOM
       1101
            C5
                 CYT
                        93
                               -17.742 -34.530
                                                 4.623 1.00
                                                              0.00
                CYT
                               -16.728 -35.020
ATOM
       1102
            C4
                        93
                                                 5.516 1.00
                                                              0.00
                CYT
                               -16.886 -34.941
ATOM
       1103
             N4
                        93
                                                 6.838 1.00
                                                              0.00
            N3 CYT
                               -15.569 -35.504
                                                 5.051 1.00
                                                              0.00
ATOM
       1104
                        93
                               -15.299 -35.532
ATOM
       1105
            C2 CYT
                                                        1.00
                        93
                                                 3.717
                                                              0.00
ATOM
       1106
            02 CYT
                        93
                               -14.230 -35.985
                                                 3.318 1.00
                                                              0.00
ATOM
       1107 C3' CYT
                               -17.084 -35.273
                        93
                                                -0.720 1.00
                                                              0.00
       1108 C2' CYT
                        93
                               -16.838 -35.975
ATOM
                                                 0.615 1.00
                                                              0.00
ATOM
       1109 03' CYT
                        93
                               -16.347 -35.899 -1.750 1.00 0.00
END
HEADER 000000
REMARK
             0.00536
                       1.68544
                                 0.02557
                                           0.01759
                                                     2.00480
                                                               1.73196
 0.00000
REMARK
             2.71754
                       0.28324
                                 0.50667
                                           1.17201
                                                     0.75562
REMARK
             0.01087
                       0.00432
                                 0.00553
                                           0.02058
                                                     0.00901
REMARK
                 117
                           113
                                       4
                                                 0
                                                                     0
       0
REMARK
                1378
                           305
                                     460
                                               273
                                                         340
REMARK
             0.03732
                       0.17225
                                 0.03478
                                           0.04510
                                                     0.17225
                                                               0.15869
REMARK
             0.31897
                       0.02596
                                                 0
                                                           0
REMARK
                   1
                             1
                                       0
                                                                     0
       0
          1 N
                 GLU
                                -6.519 -17.653 28.165 1.00
ATOM
                         1
                                                              0.00
ATOM
          2
             CA GLU
                         1
                                -6.516 -16.499
                                                27.250
                                                       1.00
                                                              0.00
ATOM
                                -6.835 -15.208
          3
             CB
                 GLU
                                                28.031 1.00
                                                              0.00
                         1
ATOM
             CG
                 GLU
                                -7.090 -13.950
                                                27.183
                         1
                                                        1.00
                                                              0.00
ATOM
             CD
                 GLU
                         1
                                -8.112 -14.185
                                                26.077
                                                        1.00
                                                              0.00
ATOM
          6
             OE1 GLU
                         1
                                -9.317 -14.028
                                                26.359
                                                        1.00
                                                              0.00
ATOM
             OE2 GLU
                                -7.667 -14.545
                                                24.965
                                                              0.00
          7
                         1
                                                       1.00
ATOM
          8 C
                 GLU
                         1
                                -5.179 -16.451 26.505 1.00 0.00
```

	400				(240)					003-13
	477	_							478	
ATOM	9	0	GLU	1	-4.263 -			1.00	0.00	
ATOM	10		LYS	2	-5.092 -		25.488	1.00	0.00	
ATOM	11		LYS	2	-3.936 -	15.377	24.625	1.00	0.00	•
ATOM	12	CB	LYS	2	-4.197 -	14.131	23.774	1.00	0.00	•
ATOM	13	CG	LYS	2	-5.347 -	14.396	22.795	1.00	0.00	
ATOM	14	CD	LYS	2	-6.048 -	13.093	22.391	1.00	0.00	
ATOM	15	CE	LYS	2	-7.300 -	13.428	21.575	1.00	0.00	
ATOM	16	NZ	LYS	2	-8.398 -	13.959	22.409	1.00	0.00	
ATOM	17	C	LYS	2	-2.633 -	15.224	25.414	1.00	0.00	
ATOM	18	0	LYS	2	-2.618 -	14.659	26.508	1.00	0.00	
ATOM	19	N	HIS	3	-1.542 -	15.741	24.843	1.00	0.00	
ATOM	20	CA	HIS	3	-0.215 -	15.701	25.438	1.00	0.00	
ATOM	21	CB	HIS	3	0.594 -	16.910	24.949	1.00	0.00	
ATOM	22	CG	HIS	3	0.730 -	17.013	23.449	1.00	0.00	
ATOM	23	ND1	HIS	3	1.344 -	16.041	22.672	1.00	0.00	
ATOM	24	CE1	HIS	3	1.294 -	16.458	21.396	1.00	0.00	
ATOM	25		HIS	3	0.688 -		21.263	1.00	0.00	
ATOM	26		HIS	3	0.332 -		22.562	1.00	0.00	
ATOM	27	C	HIS	3	0.490 -		25.117	1.00	0.00	
ATOM	28	0	HIS	3	-0.005 -		24.336	1.00	0.00	
ATOM	29	N	ARG	4	1.666 -		25.718	1.00	0.00	
ATOM	30	CA	ARG	4	2.465 -		25.501	1.00	0.00	
ATOM	31	CB	ARG	4	3.580 -		26.552	1.00	0.00	
ATOM	32	CG	ARG	4	3.067 -		28.002	1.00	0.00	
ATOM	33	CD	ARG	4	1.974 -		28.288	1.00	0.00	
ATOM	34	NE	ARG	4	2.411 -		27.931	1.00	0.00	
ATOM	35	CZ	ARG	4	1.616		27.906	1.00	0.00	
ATOM	36		ARG	4		-8.232	27.555	1.00	0.00	
ATOM	37		ARG	4		-9.520	28.233	1.00	0.00	
ATOM	38	C	ARG	4		12.989		1.00	0.00	
ATOM	39	0	ARG	4		12.048		1.00	0.00	
ATOM	40	N	ALA	5	3.752 -		23.727	1.00	0.00	
ATOM	41	CA		5			22.418			
ATOM	42		ALA	5			22.215			
ATOM	43	С	ALA	5			22.311	1.00		
ATOM	44	0	ALA	5			23.325	1.00		
ATOM	45	'n	ARG	6			21.084	1.00		
ATOM	46	CA	ARG	6		-17.569		1.00		
ATOM	47	CB	ARG	6		-18.625	20.723	1.00	0.00	
ATOM	48	CG	ARG	6		-18.921	22.400	1.00		
ATOM	49	CD	ARG	6		-20.140	22.461	1.00		
ATOM	50	NE	ARG	6		-20.347		1.00		
ATOM	51	CZ	ARG	6		-21.164		1.00		
ATOM	52		ARG	6		-21.273		1.00	0.00	
ATOM	53		ARG	6						
ATOM	54		ARG	6		-21.871 -17.468	23.174 19.244	1.00	0.00 $0.00$	
ATOM	55	0	ARG	6		-17.408		1.00		
ATOM	56	N	LYS	7		-16.953		1.00		
ATOM	57		LYS	7		-16.933		1.00		
ATOM	58		LYS	7		-16.310	17.538			
AIUM	20	CD	LIJ	1	0.100	10.010	11.000	1.00	0.00	

479 480 ATOM 59 CG LYS 9.065 -15.584 16.215 1.00 0.00 7 16.101 1.00 0.00 ATOM CDLYS 10.526 -15.130 ATOM CE LYS 7 10.670 -14.050 15.020 1.00 0.00 61 7 13.704 1.00 ATOM 62 NZ LYS 10.178 -14.498 0.00 **ATOM** C LYS 7 6.993 - 17.88516.639 1.00 0.00 63 **ATOM** 64 0 LYS 7 7.642 -18.928 16.690 1.00 0.00 ATOM 65 N ARG 8 5.979 -17.682 15.793 1.00 0.00 ATOM CA ARG 8 5.493 ~18.649 14.824 1.00 0.00 66 ATOM CB ARG 8 4.343 -18.018 14.039 1.00 0.00 67 ATOM CG ARG 8 3.057 -18.034 14.869 1.00 0.00 ARG 14.078 ATOM CD 8 1.923 -17.380 1.00 0.00 69 0.00 ARG 14.699 1.00 ATOM 70 NE 8 0.623 - 17.654CZARG -0.517 -17.025 14.379 1.00 0.00 ATOM 71 8 ATOM NH1 ARG 8 -0.517 -16.038 13.478 1.00 0.00 72 ATOM NH2 ARG 8 -1.667 -17.362 14.976 1.00 0.00 73 C ARG 8 6.602 -19.092 13.876 1.00 0.00 ATOM 74 0 ARG 7.522 -18.324 13.585 1.00 0.00 ATOM 75 8 9 N GLN 6.506 ~20.334 13.391 1.00 0.00 ATOM 76 ATOM CAGLN 9 7.494 -20.879 12.479 1.00 0.00 77 GLN **ATOM** 78 CB 9 7.707 - 22.38612.681 1.00 0.00 ATOM 79 CG GLN 9 6.438 -23.253 12.689 1.00 0.00 CD GLN ATOM 80 9 6.762 -24.721 12.424 1.00 0.00 ATOM OE1 GLN 9 7.929 -25.104 12.376 1.00 0.00 81 ATOM NE2 GLN 5.736 -25.549 12.220 0.00 82 9 1.00 C GLN 7.148 -20.508 11.039 ATOM 83 9 1.00 0.00 0 GLN 9 6.592 -21.317 **ATOM** 84 10.296 1.00 0.00 **ATOM** N ALA 7.507 -19.281 10.640 1.00 0.00 85 10 ATOM CA ALA 7.292 -18.814 9.277 1.00 0.00 86 10 ATOM 87 CBALA 7.836 -17.394 9.108 1.00 0.00 10 C 7.982 -19.801 1.00 0.00 ATOM 88 ALA 10 8.338 ATOM 89 0 ALA 10 9.092 -20.247 8.632 1.00 0.00 ATOM 90 N TRP 7.324 -20.177 7.239 1.00 0.00 11 ATOM · 91 CA TRP 11 7.903 -21.163 6.341 1.00 0.00 CBTRP 6.926 -21.572 ATOM 92 5.245 1.00 0.00 11 ATOM 93 CG TRP 11 5.741 -22.392 5.666 1.00 0.00 CD1 TRP 4.843 -22.078 ATOM 94 11 6.628 1.00 0.00 ATOM NE1 TRP 3.884 -23.062 1.00 0.00 95 11 6.722 ATOM CE2 TRP 4.121 -24.073 5.817 1.00 0.00 96 11 ATOM 97 CZ2 TRP 3.450 -25.264 5.519 1.00 0.00 11 CH2 TRP 3.951 -26.104 **ATOM** 4.523 1.00 0.00 98 11 CZ3 TRP 5.119 -25.750 1.00 0.00 ATOM 99 11 3.826 ATOM CE3 TRP 5.784 -24.547 1.00 100 4.127 0.00 11 ATOM 101 CD2 TRP 5.306 -23.677 5.132 1.00 0.00 11 9.221 -20.673 ATOM 102 С TRP 11 5.746 1.00 0.00 ATOM 103 0 TRP 9.356 -19.516 5.349 1.00 0.00 11 ATOM 104 N LEU 12 10.185 -21.590 5.704 1.00 0.00 ATOM 105 CA LEU 12 11.527 -21.384 5.188 1.00 0.00 6.031 ATOM 106 CBLEU 12 12.482 -22.247 1.00 0.00 ATOM CG LEU 12 13.972 -22.146 5.668 1.00 0.00 107 ATOM CD1 LEU 12 14.522 -20.728 5.864 1.00 0.00 108

```
481
                                                                   482
ATOM
        109 CD2 LEU
                         12
                                 14.768 -23.121
                                                   6.542 1.00 0.00
             C
ATOM
        110
                 LEU
                         12
                                 11.534 -21.789
                                                   3.713 1.00
                                                                0.00
        111 0
ATOM
                 LEU
                         12
                                 10.676 -22.573
                                                   3.296
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
                 TRP
        112
             N
                         13
                                 12.498 -21.276
                                                   2.926
                                                          1.00
                                                                0.00
                 TRP
ATOM
        113 CA
                         13
                                 12.577 -21.634
                                                   1.514 1.00
                                                                0.00
ATOM
        114
             CB
                 TRP
                         13
                                 13.840 -21.169
                                                   0.758 1.00
                                                                0.00
                 TRP
                                                          1.00
ATOM
        115
             CG
                         13
                                 15.064 -21.962
                                                   1.108
                                                                0.00
ATOM
        116
             CD1 TRP
                         13
                                 15.662 -21.812
                                                   2.284
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        117
             NE1 TRP
                                 16.747 -22.639
                                                          1.00
                         13
                                                   2.427
                                                                0.00
ATOM
        118
             CE2 TRP
                                 16.889 -23.418
                                                   1.301
                         13
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        119
             CZ2 TRP
                                 17.805 -24.421
                                                   0.958
                         13
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        120
             CH2 TRP
                                 17.670 -25.071
                                                  -0.273
                                                          1.00
                         13
                                                                0.00
ATOM
        121
             CZ3 TRP
                         13
                                 16.630 -24.702
                                                  -1.141
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        122
             CE3 TRP
                                 15.720 -23.685
                                                  -0.799
                                                          1.00
                         13
                                                                0.00
ATOM
        123
             CD2 TRP
                                 15.822 -23.014
                                                   0.434
                                                          1.00
                                                                0.00
                         13
ATOM
        124
             С
                 TRP
                         13
                                 12.541 -23.140
                                                   1.380
                                                          1.00
                                                                0.00
        125
             0
                 TRP
ATOM
                         13
                                 11.803 -23.596
                                                   0.541
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        126
             N
                 GLU
                                 13.326 -23.905
                         14
                                                   2.156
                                                          1.00
                                                                0.00
             CA
                 GLU
ATOM
        127
                                 13.380 -25.343
                                                   1.987
                                                                0.00
                         14
                                                          1.00
                 GLU
ATOM
        128
             CB
                                 14.573 -25.985
                                                   2.696
                                                          1.00
                                                                0.00
                         14
                 GLU
ATOM
        129
             CG
                                 14.812 -27.418
                         14
                                                   2.187
                                                          1.00
                                                                0.00
                 GLU
ATOM
        130
             CD
                                 16.292 -27.715
                                                   1.976
                                                          1.00
                                                                0.00
                         14
             OE1 GLU
                                 16.641 -28.036
ATOM
        131
                         14
                                                   0.816 1.00
                                                                0.00
ATOM
        132
             OE2 GLU
                                 17.047 -27.606
                                                   2.966
                                                         1.00
                                                                0.00
                         14
             C
ATOM
        133
                  GLU
                                 12.012 -26.006
                                                                0.00
                         14
                                                   2.145 1.00
ATOM
        134
             0
                  GLU
                                 11.727 -26.959
                                                   1.423 1.00
                                                                0.00
                         14
             N.
                  GLU
ATOM
        135
                         15
                                 11.142 -25.499
                                                         1.00
                                                                0.00
                                                   3.029
ATOM
        136
             CA
                 GLU
                                  9.802 -26.053
                                                         1.00
                                                                0.00
                         15
                                                   3.159
ATOM
        137
             CB
                 GLU
                         15
                                  9.086 -25.550
                                                   4.417 1.00
                                                                0.00
ATOM
        138
             CG
                 GLU
                         15
                                  9.708 -26.047
                                                   5.726
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        139
             CD
                 GLU
                                  8.748 -25.800
                         15
                                                   6.886
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        140
             OE1 GLU
                         15
                                  8.740 -24.657
                                                   7.392
                                                          1.00
                                                                0.00
             OE2 GLU
ATOM
        141
                         15
                                  7.999 -26.742
                                                   7.232
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        142
             C
                  GLU
                         15
                                   8.994 -25.718
                                                   1.899
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        143
             0
                  GLU
                                   8.384 -26.606
                         15
                                                   1.315
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        144
             N
                  ASP
                         16
                                   8.988 -24.452
                                                   1.465
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        145
              CA
                 ASP
                         16
                                   8.251 -24.017
                                                   0.271
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CB
                  ASP
ATOM
        146
                         16
                                   8.363 -22.492
                                                   0.134
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        147
              CG
                 ASP
                                   7.704 -21.736
                         16
                                                   1.278
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        148
              OD1 ASP
                                   6.721 -22.264
                                                                 0.00
                         16
                                                   1.838
                                                          1.00
ATOM
              OD2 ASP
                                   8.162 -20.608
        149
                                                   1.557
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         16
ATOM
             C
                  ASP
        150
                         16
                                   8.767 -24.675
                                                  -1.017
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        151
              0
                  ASP
                                   8.004 -25.012
                                                  -1.918
                         16
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N
                  LYS
ATOM
        152
                         17
                                  10.085 -24.838
                                                  -1.081
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        153
              CA
                 LYS
                         17
                                  10.914 -25.408
                                                  -2.127
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CB
                 LYS
ATOM
        154
                         17
                                  12.398 -25.177
                                                  -1.724
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CG
                 LYS
                         17
                                  13.401 -25.972
                                                 -2.577
        155
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         156
              CD
                 LYS
                         17
                                  14.056 -27.061
                                                  -1.711
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         157
              CE
                 LYS
                         17
                                  15.059 -27.922
                                                  -2.482
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         158
              NZ LYS
                         17
                                  15.737 -28.874 -1.581 1.00
                                                                0.00
```

```
483
                                                                   484
ATOM
        159 C
                         17
                                 10.511 -26.883 -2.249
                                                         1.00 0.00
                 LYS
ATOM
        160
            0
                 LYS
                         17
                                 10.128 -27.354
                                                 -3.322
                                                          1.00
                                                               0.00
        161 N
                 ASN
                         18
                                 10.577 -27.599
                                                 -1.122
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
                                                 -1.002
ATOM
        162 CA
                 ASN
                         18
                                 10.201 -28.999
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        163
             CB
                 ASN
                         18
                                 10.465 -29.441
                                                   0.444
                                                          1.00
                                                                0.00
                                                   0.746
ATOM
        164
             CG
                 ASN
                         18
                                 10.076 -30.882
                                                          1.00
                                                                0.00
                                  9.972 -31.710
                                                  -0.154
                                                          1.00
ATOM
        165
             OD1
                 ASN
                         18
                                                                 0.00
                                  9.883 -31.179
                                                   2.032
                                                          1.00
ATOM
        166
             ND2 ASN
                         18
                                                                 0.00
             C
                                  8.731 -29.163 -1.395
ATOM
        167
                  ASN
                         18
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                  8.385 -30.072 -2.147
                                                                 0.00
ATOM
        168
             0
                  ASN
                         18
                                                          1.00
                  LEU
                                  7.866 -28.270
                                                  -0.901
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        169
             N
                         19
        170 CA
                 LEU
                                  6.442 -28.284
                                                 -1.192
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         19
             CB
                  LEU
                                  5.713 -27.193
                                                 -0.394
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        171
                         19
             CG
                 LEU
                         19
                                  4.184 -27.281
                                                 -0.522
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        172
             CD1 LEU
                                  3.664 -28.624
                                                  -0.001
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        173
                         19
             CD2 LEU
                                  3.542 -26.137
                                                   0.271
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        174
                         19
                                                          1.00
        175
             С
                  LEU
                                  6.207 - 28.135
                                                  -2.690
                                                                 0.00
ATOM
                         19
                  LEU
                                                 -3.256
        176
             0
                         19
                                  5.421 -28.886
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                  ARG
                                  6.888 -27.185
                                                  -3.342
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        177
             N
                         20
ATOM
        178
             CA
                  ARG
                         20
                                   6.755 - 26.968
                                                  -4.774
                                                           1.00
                                                                 0.00
        179
             CB
                  ARG
                                  7.559 -25.730
                                                  -5.202
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         20
                                  7.186 -25.278
             CG
                  ARG
                         20
                                                  -6.622
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        180
ATOM
        181
             CD
                  ARG
                                  7.655 -23.841
                                                  -6.893
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         20
ATOM
             NE
                  ARG
                                  7.114 -23.348
                                                  -8.173 1.00
                                                                 0.00
        182
                         20
        183
             CZ
                 ARG
                                   6.626 -22.116
                                                  -8.409
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         20
ATOM
        184
             NH1 ARG
                         20
                                   5.986 -21.859
                                                  -9.556
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        185
             NH2 ARG
                                   6.743 -21.129
                                                  -7.511
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         20
ATOM
        186
              C
                  ARG
                         20
                                   7.134 -28.243
                                                  -5.528
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        187
             0
                  ARG
                         20
                                   6.433 -28.632
                                                  -6.462
                                                           1.00
                                                                 0.00
              N
                  SER
                                   8.217 -28.911
                                                  -5.107
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         188
                         21
ATOM
         189
              \mathsf{C}\mathsf{A}
                  SER
                         21
                                   8.643 -30.169
                                                  -5.710
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                                  -5.080
ATOM
         190
              CB
                  SER
                                   9.960 -30.639
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         21
ATOM
         191
              0G
                  SER
                         21
                                  10.484 -31.731
                                                  -5.809
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C
                  SER
                                   7.530 -31.218
                                                  -5.551
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         192
                         21
                                   7.137 -31.881
ATOM
         193
             0
                  SER
                         21
                                                  -6.512
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  GLY
                                   7.012 -31.358
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         194
              N
                         22
                                                  -4.327
              CA
                  GLY
                         22
                                   5.952 -32.295
                                                  -4.005
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         195
                                   4.709 -32.066
                                                  -4.862
ATOM
         196
              C
                  GLY
                         22
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         197
              0
                  GLY
                         22
                                   4.202 -33.003
                                                  -5.470
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              N
                  VAL
                          23
                                   4.211 -30.828
                                                  -4.917
                                                           1.00
                                                                 0.00
         198
                                                  -5.686
ATOM
         199
              CA
                  VAL
                         23
                                   3.023 -30.500
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         200
              CB
                  VAL
                          23
                                   2.461 -29.119
                                                  -5.322
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CG1 VAL
                                   1.200 -28.859
                                                  -6.158
                                                                 0.00
ATOM
         201
                         23
                                                           1.00
         202
              CG2 VAL
                          23
                                   2.061 -29.073
                                                  -3.843
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
         203
              C
                  VAL
                          23
                                   3.256 -30.672
                                                   -7.186
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         204
              0
                  VAL
                          23
                                   2.367 -31.172
                                                  -7.862
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         205
              N
                  ARG
                          24
                                   4.410 -30.300
                                                  -7.752
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CA
                  ARG
                                   4.575 -30.532
                                                   -9.186
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         206
                          24
ATOM
              CB
                  ARG
                                   5.785 -29.800
                                                   -9.777
                                                           1.00
                                                                 0.00
         207
                          24
              CG ARG
                                   7.150 -30.365 -9.379
                                                          1.00 0.00
ATOM
         208
                          24
```

	405				(244) 特別2003
	485	<b>an</b>			486
ATOM	209	CD	ARG	24	8.296 -29.577 -10.020 1.00 0.00
ATOM	210	NE	ARG	24	8.294 -29.716 -11.485 1.00 0.00
ATOM	211	CZ	ARG	24	9.174 -29.132 -12.314 1.00 0.00
ATOM	212		ARG	24	9.071 -29.326 -13.635 1.00 0.00
ATOM	213	NH2	ARG	24	10.156 -28.361 -11.827 1.00 0.00
ATOM	214	C	ARG	24	4.559 -32.038 -9.485 1.00 0.00
ATOM	215	0	ARG	24	4.075 -32.454 -10.536 1.00 0.00
ATOM	216	N	LYS	25	5.076 -32.848 -8.554 1.00 0.00
ATOM	217	CA	LYS	25	5.124 -34.302 -8.677 1.00 0.00
ATOM	218	CB	LYS	25	6.274 -34.865 -7.830 1.00 0.00
ATOM	219	CG	LYS	25	7.632 -34.489 -8.440 1.00 0.00
ATOM	220	CD	LYS	25	8.823 -34.962 -7.591 1.00 0.00
ATOM	221	CE	LYS	25	8.907 -36.485 -7.413 1.00 0.00
ATOM	222	NZ	LYS	25	8.992 -37.202 -8.699 1.00 0.00
ATOM	223	С	LYS	25	3.798 -35.027 -8.386 1.00 0.00
ATOM	224	0	LYS	25	3.552 -36.061 -9.005 1.00 0.00
ATOM	225	N	TYR	26	2.965 -34.541 -7.453 1.00 0.00
ATOM	226	CA	TYR	26	1.710 -35.195 -7.055 1.00 0.00
ATOM	227	СВ	TYR	26	1.794 -35.575 -5.569 1.00 0.00
ATOM	228	CG	TYR	26	2.749 -36.720 -5.283 1.00 0.00
ATOM	229		TYR	26	2.249 -38.003 -4.991 1.00 0.00
ATOM	230		TYR	26	3.136 -39.063 -4.735 1.00 0.00
ATOM	231	CZ	TYR	26	4.523 -38.846 -4.771 1.00 0.00
ATOM	232	OH	TYR	26	5.379 -39.879 -4.522 1.00 0.00
ATOM	. 233		TYR	26	5.025 -37.567 -5.065 1.00 0.00
ATOM	234		TYR	26	4.139 -36.508 -5.316 1.00 0.00
ATOM	235	C	TYR	26	0.443 -34.373 -7.317 1.00 0.00
ATOM	236	0	TYR	26	-0.628 -34.950 -7.495 1.00 0.00
ATOM	237	N	GLY	27	0.549 -33.045 -7.330 1.00 0.00
ATOM	238	CA	GLY	27	
ATOM	239	СА	GLY		
ATOM	240	0	GLY	27 27	-1.250 -31.789 -6.216 1.00 0.00 -1.131 -32.544 -5.251 1.00 0.00
	240				
ATOM		N	GLU	28	-1.979 -30.666 -6.154 1.00 0.00
ATOM	242	CA	GLU	28	-2.702 -30.276 -4.948 1.00 0.00
ATOM	243	CB	GLU	28	-3.247 -28.834 -5.030 1.00 0.00
ATOM	244	CG	GLU	28	-3.658 -28.327 -6.422 1.00 0.00
ATOM	245	CD	GLU	28	-2.491 -27.670 -7.152 1.00 0.00
ATOM	246		GLU	28	-1.742 -28.422 -7.809 1.00 0.00
ATOM	247		GLU	28	-2.358 -26.428 -7.026 1.00 0.00
ATOM	248	C	GLU	28	-3.786 -31.316 -4.625 1.00 0.00
ATOM	249	0	GLU	28	-4.200 -32.083 -5.492 1.00 0.00
ATOM	250	N	GLY	29	-4.227 -31.355 -3.363 1.00 0.00
ATOM	251	CA	GLY	29	-5.219 -32.314 -2.891 1.00 0.00
ATOM	252	C	GLY	29	-4.567 -33.685 -2.704 1.00 0.00
ATOM	253	0	GLY	29	-5.132 -34.712 -3.077 1.00 0.00
ATOM	254	N	ASN	30	-3.362 -33.675 -2.124 1.00 0.00
ATOM	255	CA	ASN	30	-2.517 -34.825 -1.834 1.00 0.00
ATOM	256	CB	ASN	30	-1.702 -35.206 -3.086 1.00 0.00
ATOM	257	CG	ASN	30	-2.569 -35.709 -4.237 1.00 0.00
ATOM	258	OD1	ASN	30	-3.070 -36.831 -4.195 1.00 0.00

	407				(210)				400
1001	487	WDO		00	0.754	04.004	r 071	1 00	488
ATOM	259	ND2		30		-34.894		1.00	0.00
MOTA	260	C	ASN	30		-34.378	-0.708	1.00	0.00
ATOM	261	0	ASN	30		-34.653	-0.749	1.00	0.00
ATOM	262	N	TRP	31		-33.646	0.280	1.00	0.00
ATOM	263	CA	TRP	31		-33.067	1.360	1.00	0.00
ATOM	264	CB	TRP	31	-2.098	-31.928	2.018	1.00	0.00
ATOM	265	CG	TRP	31	-2.677	-30.994	1.011	1.00	0.00
ATOM	266	CD1	TRP	31	-3.987	-30.788	0.764	1.00	0.00
ATOM	267	NE1	TRP	31	-4.126	-29.867	-0.256	1.00	0.00
ATOM	268	CE2	TRP	31	-2.894	-29.437	-0.709	1.00	0.00
ATOM	269	CZ2	TRP	31	-2.494	-28.534	-1.702	1.00	0.00
ATOM	270	CH2	TRP	31	-1.125	-28.323	-1.916	1.00	0.00
ATOM	271	CZ3	TRP	31	-0.174	-29.004	-1.149	1.00	0.00
ATOM	272		TRP	31	-0.582	-29.909	-0.160	1.00	0.00
ATOM	273		TRP	31		-30.145	0.087	1.00	0.00
ATOM	274	C	TRP	31		-34.091	2.344	1.00	0.00
ATOM	275	0	TRP	31		-34.144	2.540	1.00	0.00
ATOM	276	N	SER	32		-34.910	2.951	1.00	0.00
ATOM	277	CA	SER	32		-35.939	3.882	1.00	0.00
ATOM	278	СВ	SER	32		-36.706	4.483	1.00	0.00
ATOM	279	OG	SER	32		-35.838	5.314	1.00	0.00
ATOM	280	С	SER	32		-36.877	3.168	1.00	0.00
ATOM	281	0	SER	32		-37.328	3.748	1.00	0.00
ATOM	282	N	LYS	33		-37.146	1.887	1.00	0.00
ATOM	283	CA	LYS	33		-37.140	1.041	1.00	0.00
ATOM	284	CB	LYS	33		-38.196	-0.317		0.00
	285	CG	LYS					1.00	
ATOM			LYS	33		-38.720	-0.168	1.00	0.00
ATOM	286	CD CE		33		-38.765 -38.642	-1.525	1.00	0.00
ATOM	287		LYS	33			-1.348	1.00	0.00
ATOM	288	NZ	LYS	33		-38.425	-2.635	1.00	0.00
ATOM	289	C	LYS LYS	33		-37.297	0.915	1.00	0.00
ATOM	290	0 N		33		-37.902	1.216	1.00	0.00
ATOM	291	N	ILE	34		-36.022		1.00	0.00
ATOM	292	CA	ILE	34		-35.211	0.372	1.00	0.00
ATOM	293	CB	ILE	34		-33.818	-0.199	1.00	0.00
ATOM	294		ILE	34		-32.729	0.173	1.00	0.00
ATOM	295		ILE	34		-33.923	-1.731	1.00	0.00
ATOM	296	CD1		34		-32.697	-2.367	1.00	0.00
ATOM	297	C	ILE	34		-35.168	1.710	1.00	0.00
ATOM	298	0	ILE	34		-35.184	1.708	1.00	0.00
ATOM	299	N	LEU	35		-35.138	2.843	1.00	0.00
ATOM	300	CA	LEU	35		-35.137	4.177	1.00	0.00
ATOM	301	CB	LEU	35		-34.942	5.228	1.00	0.00
ATOM	302	CG	LEU	35		-34.239	6.525	1.00	0.00
ATOM	303		LEU	35		-34.197	7.476	1.00	0.00
ATOM	304		LEU	35		-34.918	7.235	1.00	0.00
ATOM	305	C	LEU	35		-36.456	4.391	1.00	0.00
ATOM	306	0	LEU	35		-36.472	4.937	1.00	0.00
ATOM	307	N	LEU	36		-37.578	3.953	1.00	0.00
ATOM	308	CA	LEU	36	4.384	-38.884	4.088	1.00	0.00

	489								490
ATOM	309	CB	LEU	36	3.354	-39.984	3.780	1.00	0.00
ATOM	310		LEU	36		-41.415	3.881	1.00	0.00
ATOM	311	CD1		36		-41.750	5.297	1.00	0.00
ATOM	312	CD2		36		-42.405	3.471	1.00	0.00
ATOM	313		LEU	36		-38.979	3.180	1.00	0.00
ATOM	314		LEU	36		-39.428	3.616	1.00	0.00
ATOM	315		HIS	37		-38.564	1.916	1.00	0.00
ATOM	316		HIS	37		-38.607	0.919	1.00	0.00
ATOM	317		HIS	37		-38.289	-0.465	1.00	0.00
ATOM	318		HIS	37		-39.226	-0.905	1.00	0.00
ATOM	319	ND1		37		-40.603	-0.908	1.00	0.00
ATOM	320	CE1		37		-41.128	-1.349	1.00	0.00
ATOM	321	NE2		37		-40.199	-1.643	1.00	0.00
ATOM	322	CD2		37		-38.999	-1.361	1.00	0.00
ATOM	323	C	HIS	37		-37.654	1.234	1.00	0.00
ATOM	324	0	HIS	37		-37.998	0.982	1.00	0.00
ATOM	325	N	TYR	38		-36.460	1.755	1.00	0.00
ATOM	326	CA	TYR	38		-35.423	2.076	1.00	0.00
ATOM	327	CB	TYR	38		-34.294	1.045	1.00	0.00
ATOM	328	CG	TYR	38		-34.713	-0.411	1.00	0.00
ATOM	329		TYR	38		-34.917	-1.072	1.00	0.00
ATOM	330		TYR	38		-35.299	-2.422	1.00	0.00
ATOM	331	CZ	TYR	38		-35.474	-3.115	1.00	0.00
ATOM	332	OH	TYR	38		-35.838	-4.427	1.00	0.00
ATOM	333		TYR	38		-35.273	-2.460	1.00	0.00
ATOM	334		TYR	38		-34.892	-1.107	1.00	0.00
ATOM	335	C	TYR	38		-34.861	3.468	1.00	0.00
ATOM	336	0	TYR	38		-34.456	3.758	1.00	0.00
ATOM	337	N	LYS	39		-34.827	4.334	1.00	0.00
ATOM	338	CA	LYS	39		-34.328	5.696	1.00	0.00
ATOM	339		LYS	39		-35.081	6.579	1.00	0.00
ATOM	340	CG	LYS	39		-34.978	8.088	1.00	0.00
ATOM	341	CD	LYS	39		-33.846	8.758	1.00	0.00
ATOM	342	CE	LYS	39		-33.782	10.274	1.00	0.00
ATOM	343	NZ	LYS	39		-33.533	10.597	1.00	0.00
ATOM	344	С	LYS	39		-32.805	5.736	1.00	0.00
ATOM	345	0	LYS	39		-32.273	5.127		0.00
ATOM	346	N	PHE	40		-32.120	6.470	1.00	0.00
ATOM	347	CA	PHE	40		-30.671	6.686	1.00	0.00
ATOM	348	CB	PHE	40		-30.063	6.056	1.00	0.00
ATOM	349	CG	PHE	40		-30.309	4.576	1.00	0.00
ATOM	350		PHE	40		-31.478	4.128	1.00	0.00
ATOM	351	CE1	PHE	40		-31.700	2.752	1.00	0.00
ATOM	352	CZ	PHE	40		-30.754	1.820	1.00	0.00
ATOM	353		PHE	40		-29.588	2.271	1.00	0.00
ATOM	354		PHE	40		-29.363	3.644	1.00	0.00
ATOM	355	C	PHE	40		-30.426	8.198	1.00	0.00
ATOM	356	0	PHE	40		-31.387	8.965	1.00	0.00
ATOM	357	N	ASN	41	8.118	-29.175	8.662	1.00	0.00
ATOM	358	CA	ASN	41	8.076	-28.877	10.093	1.00	0.00

491 492 ATOM 359 CB ASN 41 8.424 -27.412 10.380 1.00 0.00 ATOM 360 CG ASN 41 9.825 - 26.9689.973 1.00 0.00 ATOM 0D1 ASN 10.562 -27.689 9.304 1.00 0.00 361 41 ND2 ASN 10.196 -25.764 10.407 1.00 0.00 ATOM 362 41 ATOM 363 C ASN 41 6.692 -29.198 10.674 1.00 0.00 ATOM 364 0 ASN 41 5.993 -28.310 11.161 1.00 0.00 ASN ATOM 365 N 42 6.306 - 30.47910.618 1.00 0.00CA ASN ATOM 366 42 5.043 -31.022 11.105 1.00 0.00 CB ASN 12.640 ATOM 367 42 5.039 - 31.0861.00 0.00CG ASN 42 13.215 ATOM 368 6.177 - 31.9341.00 0.00 0D1 ASN ATOM 369 42 6.942 -32.570 12.488 1.00 0.00 ND2 ASN 6.298 - 31.94814.542 ATOM 370 42 1.00 0.00C ASN 3.865 -30.233 10.527 ATOM 371 42 1.00 0.000 ASN 2.956 - 29.82511.248 1.00 0.00 ATOM 372 42 373 N ARG 3.903 -30.020 9.209 1.00 0.00 ATOM 43 CA ARG 2.893 -29.282 1.00 0.00 ATOM 374 43 8.472 ARG 375 CB 3.519 -28.693 7.200 1.00 ATOM 43 0.00 376 CGARG 4.787 -27.871 1.00 0.00 **ATOM** 43 7.479 ATOM 377 CD ARG 4.528 -26.695 8.420 1.00 0.00 43 ATOM 378 NE ARG 5.654 -25.750 1.00 0.00 43 8.413 ATOM 379 CZARG 5.616 -24.541 8.996 1.00 0.00 43 NH1 ARG ATOM 380 43 6.675 - 23.7308.931 1.00 0.00 ATOM 381 NH2 ARG 43 4.506 -24.159 9.638 1.00 0.00 ATOM 382 C ARG 43 1.725 -30.216 1.00 0.00 8.159 ATOM 383 0 ARG 43 1.873 - 31.1487.373 1.00 0.00 **ATOM** 384 N THR 44 0.572 - 29.9698.787 1.00 0.00 ATOM 385 CA THR -0.640 -30.762 8.627 1.00 0.00 44 ATOM 386 CBTHR 44 -1.687 -30.3129.666 1.00 0.00 11.058 ATOM 387 CG2 THR 44 -1.093 -30.066 1.00 0.00 ATOM 388 OG1 THR -2.320 -29.119 9.247 1.00 0.00 44 ATOM 389 C THR 44 -1.211 -30.623 7.211 1.00 0.00 ATOM 390 0 THR -0.763 -29.773 6.444 1.00 0.00 44 ATOM 391 N SER 45 -2.224 -31.433 6.872 1.00 0.00 CASER -2.898 -31.366 ATOM 392 45 5.576 1.00 0.00 SER ATOM 393 CB 45 -4.041 -32.395 5.534 1.00 0.00 ATOM 0G SER -4.782 -32.328 394 45 4.329 1.00 0.00С SER ATOM 395 45 -3.401 -29.932 5.361 1.00 0.00 0 SER **ATOM** 396 45 -3.210 - 29.3444.297 1.00 0.00 ATOM 397 N VAL 46 -4.020 -29.369 6.408 1.00 0.00 ATOM 398 CA VAL 46 -4.539 -28.010 6.432 1.00 0.00 VAL ATOM 399 CB 46 -5.280 -27.7597.760 1.00 0.00 ATOM 400 CG1 VAL 46 -5.768 -26.312 7.861 1.00 0.00 ATOM CG2 VAL -6.482 -28.694 7.928 1.00 0.00 401 46 ATOM 402 C VAL 46 -3.395 -27.0076.263 1.00 0.00 VAL ATOM 403 0 46 -3.504 - 26.0855.460 1.00 0.00 ATOM 404 N MET 47 -2.310 -27.1707.031 1.00 0.00 ATOM 405 CA MET 47 -1.163 - 26.2727.000 1.00 0.00 CBMET 47 -0.162 -26.709 ATOM 406 8.080 1.00 0.00 ATOM CG MET 47 0.789 -25.620 8.590 407 1.00 0.00 ATOM SD MET 408 47 0.068 - 24.1539.376 1.00 0.00

	493				(440)			494
ATOM	409	CE	MET	47	0.057 -23.014	7.969	1.00	0.00
ATOM	410	C	MET	47	-0.569 -26.192	5.591	1.00	0.00
ATOM	411	0	MET	47	-0.373 -25.101	5.058	1.00	0.00
ATOM	412	N	LEU	48	-0.310 -27.354	4.983	1.00	0.00
ATOM	413	CA	LEU	48	0.215 -27.486	3.632	1.00	0.00
ATOM	414	СВ	LEU	48	0.332 -28.975	3.278	1.00	0.00
ATOM	415	CG	LEU	48	1.487 -29.698	3.989	1.00	0.00
ATOM	416		LEU	48	1.201 -31.198	4.107	1.00	0.00
ATOM	417		LEU	48	2.789 -29.542	3.197	1.00	0.00
ATOM	418	C	LEU	48	-0.721 -26.779	2.648	1.00	0.00
ATOM	419	0	LEU	48	-0.278 -25.940	1.862	1.00	0.00
ATOM	420	N	LYS	49	-2.016 -27.121	2.702	1.00	0.00
ATOM	421	CA	LYS	49	-3.042 -26.548	1.844	1.00	0.00
ATOM	422	СВ	LYS	49	-4.423 -27.105	2.244	1.00	0.00
ATOM	423	CG	LYS	49	-5.657 -26.307	1.773	1.00	0.00
ATOM	424	CD	LYS	49	-6.140 -26.590	0.347	1.00	0.00
ATOM	425	CE	LYS	49	-5.199 -26.209	-0.795	1.00	0.00
ATOM	426	NZ	LYS	49	-5.781 -26.607	-2.089	1.00	0.00
ATOM	427	C	LYS	49	-3.035 -25.023	1.908	1.00	0.00
ATOM	428	0	LYS	49	-2.915 -24.365	0.877	1.00	0.00
ATOM	429	N	ASP	50	-3.199 -24.464	3.111	1.00	0.00
ATOM	430	CA	ASP	50	-3.263 -23.026	3.309	1.00	0.00
ATOM	431	СВ	ASP	50	-3.573 -22.689	4.767	1.00	0.00
ATOM	432	CG	ASP	50	-3.804 -21.191	4.927	1.00	0.00
ATOM	433		ASP	50	-3.144, -20.600	5.807	1.00	0.00
ATOM	434		ASP	50	-4.658 -20.662	4.181	1.00	0.00
ATOM	435	С	ASP	50	-1.994 -22.331	2.823	1.00	0.00
ATOM	436	0	ASP	50	-2.077 -21.296	2.169	1.00	0.00
ATOM	437	N	ARG	51	-0.818 -22.894	3.119	1.00	0.00
ATOM	438	CA	ARG	51	0.425 -22.291	2.661	1.00	0.00
ATOM	439	CB	ARG	51	1.638 -23.064	3.190	1.00	0.00
ATOM	440	CG	ARG	51	2.891 -22.192	3.356	1.00	0.00
ATOM	441	CD	ARG	51	3.194 -21.219	2.220	1.00	0.00
ATOM	442	NE	ARG	51	4.555 -20.668	2.336	1.00	0.00
ATOM	443	CZ	ARG	51	4.888 -19.398	2.621	1.00	0.00
ATOM	444	NH1	ARG	51	3.976 -18.531	3.070	1.00	0.00
ATOM	445	NH2	2 ARG	51	6.150 -18.985	2.459	1.00	0.00
ATOM	446	C	ARG	51	0.413 -22.229	1.130	1.00	0.00
ATOM	447	0	ARG	51	0.636 -21.167	0.554	1.00	0.00
ATOM	448	N	TRP	52	0.136 -23.355	0.459	1.00	0.00
ATOM	449	CA	TRP	52	0.082 -23.411	-0.991	1.00	0.00
ATOM	450	CB	TRP	52	-0.278 -24.833	-1.404	1.00	0.00
ATOM	451	CG	TRP	52	-0.121 -25.126	-2.855	1.00	0.00
ATOM	452		TRP	52	-1.127 -25.405	-3.710	1.00	0.00
ATOM .			TRP	52	-0.617 -25.647	-4.967	1.00	0.00
ATOM	454		2 TRP	52	0.759 -25.522	-4.978	1.00	0.00
ATOM	455		2 TRP	52 <b>5</b> 2	1.724 -25.664	-5.984	1.00	0.00
ATOM	456		2 TRP	52	3.077 -25.479	-5.664	1.00	0.00
ATOM	457		3 TRP	52	3.450 -25.145		1.00	0.00
ATOM	458	CE3	3 TRP	52	2.473 -25.003	-3.349	1.00	0.00

```
495
                                                                    496
ATOM
        459
             CD2 TRP
                         52
                                  1.104 -25.188 -3.637 1.00 0.00
             C
                         52
                                 -0.926 -22.401 -1.544
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        460
                  TRP
ATOM
        461
             0
                  TRP
                         52
                                  -0.655 -21.729
                                                  -2.538
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  ARG
                                 -2.082 -22.289
                                                  -0.885
ATOM
        462 N
                         53
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        463
             \mathsf{CA}
                  ARG
                         53
                                  -3.138 -21.357
                                                  -1.246
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        464
             CB
                  ARG
                         53
                                 -4.318 -21.559
                                                  -0.287
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        465
             CG
                  ARG
                         53
                                  -5.542 -20.710
                                                  -0.630
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        466
             CD
                  ARG
                         53
                                  -6.750 -21.207
                                                   0.174
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  ARG
ATOM
        467
             NE
                         53
                                  -6.557 - 21.081
                                                   1.629
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        468
             CZ
                  ARG
                         53
                                  -7.442 -21.515
                                                    2.543
                                                          1.00
                                                                 0.00
             NH1 ARG
ATOM
        469
                         53
                                  -8.504 -22.237
                                                    2.174
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                  -7.263 -21.227
                                                    3.835
ATOM
        470
             NH2 ARG
                         53
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C
                  ARG
                                  -2.575 -19.935
ATOM
        471
                         53
                                                  -1.224
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                                                 0.00
             0
                  ARG
                                  -2.762 -19.189
                                                  -2.182
                                                          1.00
ATOM
         472
                         53
ATOM
              N
                  THR
                                  -1.864 -19.568
                                                   -0.150
                                                           1.00
                                                                 0.00
         473
                         54
             CA
                  THR
ATOM
         474
                          54
                                  -1.234 - 18.263
                                                    0.005
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CB
                  THR
                                                           1.00
ATOM
         475
                         54
                                  -0.631 - 18.154
                                                    1.414
                                                                 0.00
              CG2 THR
                                  -0.003 -16.783
                                                                 0.00
ATOM
         476
                          54
                                                    1.664
                                                           1.00
ATOM
              OG1 THR
                                  -1.662 -18.359
                                                    2.358
                                                           1.00
                                                                 0.00
         477
                         54
ATOM
         478
             С
                  THR
                          54
                                  -0.199 -18.025
                                                  -1.104
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         479
              0
                  THR
                                  -0.150 -16.941 - -1.685
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          54
             N
ATOM
                  MET
                                   0.625 -19.031
                                                  -1.421
                                                                 0.00
         480
                          55
                                                           1.00
ATOM
              CA
                  MET
                                   1.628 -18.911
                                                  -2.475
                                                           1.00
                                                                 0.00
         481
                          55
                  MET
ATOM
         482
              CB
                          55
                                   2.477 -20.187
                                                  -2.572
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                   3.378 -20.372 -1.346
ATOM
         483
              CG
                  MET
                          55
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              SD
                  MET
                          55
                                   4.328 -21.918
                                                  -1.312
                                                          1.00
                                                                 0.00
         484
              CE
                  MET
                                   5.574 -21.568
                                                  -2.576
ATOM
         485
                          55
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C
                  MET
                          55
                                                                 0.00
         486
                                   0.944 - 18.596
                                                  -3.811
                                                           1.00
ATOM
         487
              0
                  MET
                                   1.320 -17.647
                                                  -4.498
                          55
                                                           1.00
                                                                 0.00
              N
                  LYS
ATOM
        ·488
                          56
                                  -0.071 -19.383 -4.180
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         489
              CA
                 LYS
                          56
                                  -0.812 -19.175
                                                  -5.418
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         490
              CB
                  LYS
                                  -1.784 - 20.337
                                                   -5.651
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          56
ATOM
         491
              CG
                  LYS
                          56
                                  -0.995 -21.620
                                                  -5.926
                                                           1.00
                                                                  0.00
              CD
                  LYS
ATOM
         492
                          56
                                  -1.869 - 22.860
                                                   -6.130
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         493
              CE
                 LYS
                          56
                                  -2.832 -22.765
                                                  -7.314
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                                           1.00
ATOM
         494
              NZ
                  LYS
                          56
                                  -3.538 -24.045
                                                   -7.527
                                                                  0.00
                  LYS
              C
ATOM
         495
                          56
                                  -1.543 -17.830
                                                  -5.398
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              0
                  LYS
                                  -1.604 -17.162 -6.427
         496
                          56
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         497
              N
                  LYS
                          57
                                  -2.074 -17.410 -4.239
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         498
              \mathsf{CA}
                 LYS
                                  -2.730 -16.117 -4.076
                          57
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         499
              CB
                  LYS
                          57
                                  -3.226 -15.965
                                                   -2.629
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         500
              CG
                  LYS
                          57
                                  -3.684 -14.554
                                                  -2.232
                                                           1.00
                                                                  0.00
              CD
                  LYS
ATOM
         501
                          57
                                  -2.538 -13.665
                                                  -1.711
                                                           1.00
                                                                  0.00
         502
              CE
                 LYS
                                  -3.063 -12.312
                                                  -1.214
ATOM
                          57
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         503
              NZ
                  LYS
                          57
                                  -1.959 -11.427
                                                   -0.797
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         504
              C
                  LYS
                          57
                                  -1.736 -15.031
                                                   -4.487
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         505
              0
                  LYS
                          57
                                  -2.104 -14.090
                                                   -5.187
                                                           1.00
                                                                  0.00
              N
                  LEU
ATOM
         506
                          58
                                  -0.468 -15.179 -4.080
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              CA LEU
                                   0.611 - 14.257
                                                   -4.421
                                                           1.00
         507
                          58
                                                                  0.00
ATOM
         508
              CB
                 LEU
                          58
                                   1.671 -14.332 -3.307 1.00 0.00
```

```
497
                                                                 498
ATOM
        509 CG LEU
                        58
                                 2.556 -13.079 -3.199 1.00 0.00
ATOM
        510 CD1 LEU
                        58
                                 1.819 -11.951 -2.463 1.00
                                                               0.00
ATOM
        511
            CD2 LEU
                        58
                                 3.837 -13.432 -2.435
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        512 C
                 LEU
                        58
                                 1.186 -14.575
                                                -5.819
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        513 0
                 LEU
                        58
                                 2.324 -14.221
                                                -6.122
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        514
            N
                 LYS
                        59
                                 0.398 -15.240 -6.676
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        515 CA
                LYS
                        59
                                 0.711 -15.642 -8.041
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        516 CB
                 LYS
                        59
                                 0.585 - 14.435 - 8.985
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        517 CG
                 LYS
                        59
                                 0.294 -14.899 -10.422
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        518 CD
                 LYS
                        59
                                 0.634 -13.854 -11.493
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        519 CE
                 LYS
                        59
                                 2.121 -13.472 -11.544
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        520
            NZ
                 LYS
                        59
                                 3.009 -14.650 -11.518
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        521
            C
                 LYS
                        59
                                 2.060 -16.357 -8.170
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        522
             0
                 LYS
                        59
                                 2.789 -16.119
                                                -9.134
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        523 N
                 LEU
                        60
                                 2.402 -17.239
                                                -7.220
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        524
             CA
                 LEU
                        60
                                 3.667 -17.962
                                                -7.280
                                                         1.00
                                                               0.00
                 LEU
ATOM
        525
            CB
                        60
                                 4.214 -18.284 -5.886
                                                        1.00
                                                               0.00
             CG
                 LEU
ATOM
        526
                        60
                                 4.527 - 17.036
                                                -5.039
                                                         1.00
                                                               0.00
        527
             CD1 LEU
ATOM
                        60
                                  5.132 -17.471 -3.701
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        528
             CD2 LEU
                                 5.505 -16.071
                                                -5.722
                        60
                                                         1.00
                                                               0.00
        529 C
                 LEU
ATOM
                        60
                                 3.594 -19.200 -8.174
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        530 0
                 LEU
                        60
                                  4.605 -19.561 -8.781
                                                         1.00
                                                               0.00
        531 N
                 ILE
                                  2.426 -19.853 -8.259
ATOM
                        61
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        532
             CA
                 ILE
                        61
                                  2.221 -21.039
                                                -9.081
                                                         1.00
                                                               0.00
                 ILE
ATOM
        533
             CB
                                  2.257 -22.338
                                                -8.245
                        61
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        534
             CG2 ILE
                                  2.506 -23.522 -9.188
                        61
                                                         1.00
                                                               0.00
             CG1 ILE
ATOM
        535
                                  3.307 -22.342 -7.123
                                                               0.00
                        61
                                                        1.00
ATOM
             CD1 ILE
                                  2.688 -21.958
                                                -5.775
        536
                        61
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        537
             C
                 ILE
                                                -9.824
                                                               0.00
                        61
                                  0.893 - 20.889
                                                         1.00
ATOM
        538
             0
                 ILE
                        61
                                 -0.173 -21.058 -9.234
                                                         1.00
                                                               0.00
        539
             N
                 SER
ATOM
                        62
                                  0.950 -20.574 -11.119
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        540
             CA
                 SER
                        62
                                 -0.227 -20.399 -11.953
                                                         1.00
                                                               0.00
        541
ATOM
             CB
                 SER
                        62
                                 -0.934 -19.081 -11.603
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        542
             OG.
                 SER
                        62
                                 -0.005 -18.028 -11.461
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
             C
                 SER
        543
                        62
                                  0.189 -20.468 -13.420
                                                         1.00
                                                              0.00
                                  1.356 -20.247 -13.749
                                                               0.00
ATOM
        544
             0
                 SER
                        62
                                                         1.00
ATOM
        545
             N
                 SER
                        63
                                 -0.770 -20.789 -14.293
                                                         1.00
                                                               0.00
             CA
                 SER
ATOM
        546
                        63
                                 -0.556 -20.911 -15.727
                                                         1.00
                                                               0.00
                 SER
ATOM
        547
             CB
                        63
                                 -1.697 -21.734 -16.337
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        548
             0G
                 SER
                        63
                                 -1.783 -22.987 -15.687
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
             C
                 SER
        549
                        63
                                 -0.468 -19.521 -16.354
                                                         1.00
                                                               0.00
             0
ATOM
                 SER
        550
                        63
                                 -1.382 -19.096 -17.057
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        551
             N
                 ASP
                                  0.639 -18.816 -16.095
                                                         1.00
                                                               0.00
                         64
ATOM
             CA
                 ASP
        552
                         64
                                  0.893 -17.468 -16.592
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        553
             CB
                 ASP
                                  1.945 -16.787 -15.698
                         64
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        554
             CG
                 ASP
                                  1.579 -16.728 -14.217
                                                         1.00
                                                               0.00
                         64
ATOM
        555
             OD1 ASP
                                  0.383 -16.879 -13.884
                                                         1.00
                         64
                                                               0.00
ATOM
        556
             OD2 ASP
                         64
                                  2.516 -16.518 -13.416
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        557
             C
                 ASP
                         64
                                  1.339 -17.502 -18.061
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        558
             0
                 ASP
                                  2.342 -16.891 -18.426 1.00 0.00
                         64
```

499 500 ATOM 559 N SER 65 0.596 -18.220 -18.908 1.00 0.00 SER 0.00 ATOM 560 CA 65 0.853 -18.375 -20.331 1.00 ATOM 561 CB SER 65 0.645 -19.849 -20.704 1.00 0.00 SER ATOM 562 OG. 65 -0.545 -20.351 -20.124 1.00 0.00 **ATOM** 563 C SER 65 -0.059 -17.421 -21.104 1.00 0.00 0 SER ATOM 564 65 -0.848 -17.846 -21.946 1.00 0.00 N GLU 0.066 -16.125 -20.801 ATOM 565 66 1.00 0.00GLU CA -0.696 -15.042 -21.404 0.00 ATOM 566 66 1.00 ATOM 567 CB GLU -1.459 -14.275 -20.311 1.00 0.00 66 568 CG GLU -0.582 -13.847 -19.122 1.00 0.00 ATOM 66 ATOM CD GLU -1.363 -13.024 -18.101 1.00 0.00 569 66 OE1 GLU ATOM -2.545 -13.362 -17.874 1.00 0.00 570 66 ATOM 571 OE2 GLU -0.760 -12.076 -17.555 1.00 0.00 66 C GLU ATOM 572 66 0.237 - 14.140 - 22.2161.00 0.00 ATOM 573 0 GLU 1.415 -14.005 -21.885 1.00 0.00 66 ASP ATOM N 574 67 -0.302 -13.539 -23.281 1.00 0.00 CA ASP 0.396 -12.649 -24.197 ATOM 575 67 1.00 0:00 CBASP 1.250 -13.476 -25.170 **ATOM** 576 67 1.00 0.00 ATOM CG ASP 2.025 -12.595 -26.145 577 67 1.00 0.00 2.971 -11.922 -25.678 ATOM 578 OD1 ASP 67 1.00 0.00 ATOM OD2 ASP 1.689 -12.638 -27.349 579 67 1.00 0.00 C ASP -0.664 -11.834 -24.941 0.00 ATOM 580 67 1.00 **ATOM** OT1 ASP -0.578 -10.590 -24.842 1.00 0.00 581 67 ATOM OT2 ASP -1.725 -12.446 -25.204 582 67 1.00 0.00 ATOM 05' GUA -8.483 -40.715 10.490 583 68 1.00 0.00 C5' GUA ATOM 584 68 -8.157 -41.425 9.315 1.00 0.00 **ATOM** 585 C4' GUA 68 -8.258 -40.508 8.094 1.00 0.00 ATOM 586 04' GUA 68 -9.538 -39.912 8.011 1.00 0.00 ATOM 587 C1' GUA 68 -9.444 -38.814 7.130 1.00 0.00 ATOM 588 N9 GUA -10.576 -37.88668 7.334 1.00 0.00 ATOM 589 **C8** GUA 68 -11.038 -37.374 8.517 1.00 0.00 ATOM 590 N7 GUA 68 -12.116 -36.651 8.404 1.00 0.00 ATOM 591 C5 GUA 68 -12.377 - 36.6607.038 1.00 0.00 C6 GUA ATOM 592 68 -13.432 - 36.0476.296 1.00 0.00 ATOM 593 06 GUA 68 -14.411 -35.441 6.728 1.00 0.00 0.00 ATOM 594 N1 GUA 68 -13.275 -36.203 4.925 1.00 ATOM C2GUA -12.257 -36.920 595 68 4.329 1.00 0.00 ATOM N2 GUA -12.231 -36.974 596 68 2.997 1.00 0.00 ATOM 597 N3 GUA 68 -11.299 -37.547 5.024 1.00 0.00 ATOM C4 GUA -11.410 -37.374 598 68 6.369 1.00 0.00 ATOM 599 C3' GUA 68 -7.270 -39.332 8.117 1.00 0.00 ATOM 600 C2' GUA -8.129 -38.191 68 7.555 1.00 0.00 03' ATOM 601 GUA 68 -6.150 -39.673 7.308 1.00 0.00 THY ATOM 602 P 69 -4.928 -38.6556.988 1.00 0.00 ATOM 603 OP1 THY -4.631 -37.868 8.205 1.00 0.00 69 ATOM 604 OP2 THY 69 -3.848 - 39.4136.321 1.00 0.00 ATOM 605 05' THY 69 -5.556 -37.655 5.892 1.00 0.00 C5' THY ATOM 606 69 -6.188 -38.161 4.731 1.00 0.00 ATOM 607 C4' THY -7.085 -37.109 4.070 0.00 69 1.00 ATOM 608 04' THY -8.173 -36.621 69 4.815 1.00 0.00

	504				(LUL)			1411112 0
4 mov	501	0.1	m	20	0.554 05 050			502
ATOM	609	C1'	THY	69	-8.554 -35.376	4.274	1.00	0.00
ATOM	610	N1	THY	69	-9.461 -34.680	5.223	1.00	0.00
ATOM	611	C6	THY	69	-9.208 -34.736	6.572	1.00	0.00
ATOM	612	C5	THY	69	-10.036 -34.144	7.467	1.00	0.00
ATOM	613	C7	THY	69	-9.633 -34.236	8.927	1.00	0.00
ATOM	614	C4	THY	69	-11.239 -33.454	7.045	1.00	0.00
ATOM	615	04	THY	69	-12.043 -32.895	7.784	1.00	0.00
ATOM	616	N3	THY	69	-11.442 -33.468	5.675	1.00	0.00
ATOM	617	C2	THY	69	-10.598 -34.036	4.731	1.00	0.00
ATOM	618	02	THY	69	-10.867 -33.958	3.536	1.00	0.00
ATOM	619	C3'	THY	69	-6.323 -35.862	3.610	1.00	0.00
ATOM	620	C2 <b>'</b>	THY	69	-7.185 -34.719	4.155	1.00	0.00
ATOM	621	03'	THY	69	-6.205 -35.871	2.201	1.00	0.00
ATOM	622	P	THY	70	-5.287 -34.799	1.426	1.00	0.00
ATOM	623	0P1	THY	. 70	-4.816 -35.424	0.173	1.00	0.00
ATOM	624	0P2	THY	70	-4.296 -34.255	2.380	1.00	0.00
ATOM	625	05'	THY-	70	-6.319 -33.624	1.050	1.00	0.00
ATOM	626	C5'	THY	70	-7.353 -33.835	0.107	1.00	0.00
ATOM	627	C4'	THY	70	-8.385 -32.707	0.191	1.00	0.00
ATOM	628	04'	THY	70	-8.886 -32.613	1.504	1.00	0.00
ATOM	629	C1'	THY	70	-9.471 -31.341	1.650	1.00	0.00
ATOM	630	N1	THY	70	-9.667 -31.040	3.090	1.00	0.00
ATOM	631	C6	THY	70	-8.666 -31.305	3.993	1.00	0.00
ATOM	632	C5	THY	70	-8.848 -31.099	5.319	1.00	0.00
ATOM	633	C7	THY	70	-7.663 -31.431	6.202	1.00	0.00
ATOM	634	C4	THY	70	-10.099 -30.595	5.846	1.00	0.00
ATOM	635	04	THY	70	-10.342 -30.364	7.028	1.00	0.00
ATOM	636	N3	THY	70	-11.069 -30.391	4.880	1.00	0.00
ATOM	637	C2	THY	70	-10.902 -30.548	3.513	1.00	0.00
ATOM	638	02	THY	70	-11.802 -30.230	2.742	1.00	0.00
ATOM	639	C3'	THY	70	-7.833 -31.308	-0.120	1.00	0.00
ATOM	640	C2'	THY	70	-8.443 -30.428	0.984	1.00	0.00
ATOM	641	03'	THY	70	-8.220 -30.954	-1.438	1.00	0.00
ATOM	642	P	ADE	71	-7.750 -29.589	-2.158	1.00	0.00
ATOM	643		ADE	71	-8.032 -29.690	-3.604	1.00	0.00
ATOM	644		ADE	71	-6.377 -29.241	-1.714	1.00	
ATOM	645	05'		71	-8.740 -28.484	-1.541	1.00	
ATOM	646	C5'	ADE	71	-10.121 -28.458	-1.864	1.00	
ATOM	647	64'	ADE	71	-10.864 -27.415	-1.016	1.00	
ATOM	648	04'		71	-11.090 -27.887	0.313	1.00	
ATOM	649	C1'	ADE	71	-10.859 -26.812	1.202	1.00	
ATOM	650	N9	ADE	71	-10.594 -27.194	2.607	1.00	
ATOM	651	C8	ADE	71	-9.432 -27.701	3.129	1.00	
ATOM	652	N7	ADE	71	-9.386 -27.756	4.428	1.00	
ATOM	653	C5	ADE	71	-10.616 -27.236	4.800	1.00	
ATOM	654	C6	ADE	71	-11.191 -26.984	6.055	1.00	
ATOM	655	N6	ADE	71	-10.550 -27.277	7.186	1.00	
ATOM	656	NO N1	ADE	71	-12.403 -26.402	6.111	1.00	
ATOM	657	C2	ADE	71	-13.020 -26.100	4.970	1.00	
ATOM	658	N3	ADE	71	-12.595 -26.303	3.724	1.00	
AIUM	000	110	UDE	1.1	12.000 20.000	0.14	1.00	0.00

```
503
                                                                    504
ATOM
        659
                 ADE
                                                   3.705 1.00 0.00
             C4
                         71
                                -11.364 -26.884
             C3'
                 ADE
                         71
                                                                 0.00
        660
                                -10.056 -26.111
                                                  -0.872
                                                          1.00
ATOM
             C2'
                 ADE
                                 -9.583 -26.286
                                                   0.565
ATOM
        661
                         71
                                                          1.00
                                                                 0.00
        662 03'
                 ADE
                         71
                                -10.914 -25.001
                                                  -1.005
ATOM
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        663
             P
                 GUA
                         72
                                -10.381 -23.486
                                                  -1.141
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OP1 GUA
                         72
                                 -9.196 -23.296
                                                  -0.268
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        664
             OP2 GUA
ATOM
        665
                         72
                                -10.307 -23.134
                                                  -2.575
                                                           1.00
                                                                 0.00
             05'
                 GUA
                                -11.608 -22.707
                                                  -0.463
                                                                 0.00
ATOM
        666
                         72
                                                          1.00
             C5'
                 GUA
ATOM
        667
                         72
                                -12.941 -22.854
                                                  -0.915
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        668
             C4'
                 GUA
                         72
                                -13.909 -22.347
                                                   0.160
                                                          1.00
                                                                 0.00
             04'
ATOM
        669
                 GUA
                         72
                                -13.753 -23.099
                                                   1.358
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C1'
                 GUA
                                -13.373 -22.270
                                                                 0.00
ATOM
        670
                         72
                                                   2.445
                                                           1.00
                  GUA
ATOM
        671
             N9
                         72
                                -12.334 -22.940
                                                    3.261
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  GUA
ATOM
        672
             68
                         72
                                -11.187 -23.533
                                                   2.808
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        673
             N7
                  GUA
                         72
                                 -10.337 -23.861
                                                   3.739
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             C5
                  GUA
                                 -11.011 -23.545
                                                          1.00
        674
                         72
                                                    4.912
                                                                 0.00
ATOM
        675
             63
                  GUA
                         72
                                 -10.623 -23.755
                                                    6.267
                                                           1.00
                                                                 0.00
        676
             06
                  GUA
                         72
                                  -9.562 -24.212
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
                                                    6.680
ATOM
        677
             N1
                  GUA
                         72
                                 -11.615 -23.391
                                                    7.169
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                           1.00
ATOM
        678
             C2
                  GUA
                         72
                                 -12.837 -22.857
                                                                 0.00
                                                    6.811
ATOM
         679
             N2
                  GUA
                         72
                                 -13.666 -22.503
                                                    7.795
                                                          1.00
                                                                 0.00
              N3
ATOM
         680
                  GUA
                         72
                                 -13.195 -22.636
                                                    5.537
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         681
              C4
                  GUA
                         72
                                 -12.248 -23.008
                                                    4.634
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             C3'
                  GUA
         682
                         72
                                 -13.643 - 20.885
                                                    0.527
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         683
              C2'
                  GUA
                         72
                                 -12.773 -21.042
                                                    1.772
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              03'
                  GUA
                                 -14.883 -20.248
         684
                         72
                                                    0.783 1.00
                                                                 0.00
                                                    1.031
ATOM
         685
             P
                  GUA
                         73
                                 -15.000 -18.658
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         686
              OP1 GUA
                         73
                                 -16.396 -18.251
                                                    0.758
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OP2 GUA
ATOM
         687
                         73
                                 -13.887 -17.985
                                                    0.325
                                                           1.00
                                                                 0.00
              05'
                  GUA
                                 -14.739 -18.540
ATOM
         688
                         73
                                                    2.612
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         689
              C5'
                  GUA
                         73
                                 -15.688 -19.025
                                                    3.540
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  GUA
ATOM
         690
             C4'
                                 -15.127 -18.944
                                                           1.00
                         73
                                                    4.960
                                                                 0.00
         691
              04'
                  GUA
ATOM
                         73
                                 -13.964 - 19.744
                                                    5.087
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         692
             C1'
                  GUA
                         73
                                 -13.111 -19.111
                                                    6.013
                                                          1.00
                                                                 0.00
              N9
                  GUA
                         73
                                 -11.738 -19.658
ATOM
         693
                                                    5.956 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         694
             С8
                  GUA
                         73
                                 -10.919 -19.816
                                                    4.869
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         695
              N7
                  GUA
                         73
                                  -9.770 -20.378
                                                    5.133
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         696
              C5
                  GUA
                         73
                                  -9.822 -20.588
                                                    6.508
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         697
              6
                  GUA
                                  -8.860 -21.168
                          73
                                                    7.387
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         698
              06
                  GUA
                          73
                                  -7.738 -21.576
                                                    7.100
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         699
              N1
                  GUA
                                  -9.321 -21.259
                                                    8.697
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          73
ATOM
         700
              C2
                  GUA
                          73
                                 -10.557 -20.813
                                                    9.121
                                                           1.00
                                                                 0.00
              N2
                  GUA
ATOM
         701
                          73
                                 -10.856 - 20.911
                                                   10.417
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         702
              N3
                  GUA
                          73
                                 -11.449 -20.239
                                                    8.306
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         703
              C4
                  GUA
                                 -11.025 -20.158
                                                    7.017
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          73
              C3'
                  GUA
ATOM
         704
                          73
                                 -14.705 -17.523
                                                    5.376
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C2'
                  GUA
ATOM
         705
                                 -13.187 -17.678
                                                    5.509
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          73
ATOM
         706
              03'
                  GUA
                          73
                                 -15.332 -17.234
                                                                 0.00
                                                    6.613 1.00
ATOM
         707
              P
                  GUA
                          74
                                 -15.289 -15.777
                                                    7.304 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         708
              OP1 GUA
                                 -14.285 -14.939
                                                    6.612 1.00 0.00
```

					(=0 -)			131/11 0 0	
	505							506	
ATOM	709		GUA	74	-16.678 -15.290	7.457	1.00	0.00	
ATOM	710	05'	GUA	74	-14.714 -16.141	8.761	1.00	0.00	
MOTA	711	C5'	GUA	74	-15.462 -16.930	9.667	1.00	0.00	
ATOM	712	C4'	GUA	74	-14.690 -17.143	10.972	1.00	0.00	
ATOM	713	04'	GUA	74	-13.459 -17.795	10.699	1.00	0.00	
ATOM	714	C1'	GUA	74	-12.369 -17.035	11.185	1.00	0.00	
ATOM	715	N9	GUA	74	-11.231 -17.177	10.248	1.00	0.00	
ATOM	716	C8	GUA	74	-11.200 -16.877	8.909	1.00	0.00	
ATOM	717	N7	GUA	74	-10.088 -17.197	8.310	1.00	0.00	
ATOM	718	C5	GUA	74	-9.324 -17.768	9.320	1.00	0.00	
ATOM	719	C6	GUA	74	-8.037 -18.373	9.256	1.00	0.00	
ATOM	720	06	GUA	74	-7.325 -18.519	8.265	1.00	0.00	
ATOM	721	N1	GUA	74	-7.610 -18.860	10.485	1.00	0.00	
ATOM	722	C2	GUA	74	-8.357 -18.803	11.644	1.00	0.00	
ATOM	723	N2	GUA	74	-7.819 -19.307	12.756	1.00	0.00	
ATOM	724	N3	GUA	74	-9.578 -18.246	11.707	1.00	0.00	
ATOM	725	C4	GUA	74	-10.009 -17.754	10.513	1.00	0.00	
ATOM	726	C3'	GUA	74	-14.342 -15.827	11.679	1.00	0.00	
ATOM	727	C2'	GUA	74	-12.901 -15.603	11.226	1.00	0.00	
ATOM	728	03'	GUA	74	-14.462 -16.016	13.077	1.00	0.00	
ATOM	729	P	THY	75	-14.273 -14.814	14.138	1.00	0.00	
ATOM	730		THY	75	-15.304 -14.956	15.190	1.00	0.00	
ATOM	731		THY	75	-14.142 -13.537	13.402	1.00	0.00	
ATOM	732	05'	THY	75	-12.843 -15.169	14.782	1.00	0.00	
ATOM	733	C5'	THY	75	-12.688 -16.305	15.609	1.00	0.00	
ATOM	734	C4'	THY	75	-11.213 -16.494	15.963	1.00	0.00	
ATOM	735	04'	THY	75	-10.460 -16.614	14.770	1.00	0.00	
ATOM	736	C1'	THY	75	-9.210 -15.988	14.938	1.00	0.00	
ATOM	737	N1	THY	75	-8.650 -15.633	13.604	1.00	0.00	
ATOM	738	C6	THY	75	-9.394 -14.888	12.716	1.00	0.00	
ATOM	739	C5	THY	75	-8.928 -14.595	11.476	1.00	0.00	
ATOM	740	C7	THY	75	-9.814 -13.729	10.601	1.00	0.00	
ATOM	741	C4	THY	75	-7.646 -15.083	11.017	1.00	0.00	
ATOM	742	04	THY	75	-7.166 -14.908	9.901	1.00	0.00	
ATOM	743	N3	THY	75	-6.952 -15.808	11.969	1.00	0.00	
ATOM	744	C2	THY	75	-7.388 -16.109	13.249	1.00	0.00	
ATOM	745	02	THY	75	-6.670 -16.763	14.001	1.00	0.00	
ATOM	746	C3'	THY	75	-10.620 -15.306	16.740	1.00	0.00	
ATOM	747	C2'	THY	75	-9.582 -14.755	15.759	1.00	0.00	
ATOM	748	03'	THY	75	-10.082 -15.787	17.961	1.00	0.00	
ATOM	749	P	THY	76	-9.345 -14.825	19.023	1.00	0.00	
ATOM	750	0P1	THY	76	-9.427 -15.426	20.376	1.00	0.00	
ATOM	751	0P2	THY	76	-9.797 -13.431	18.826	1.00	0.00	
ATOM	752	05'	THY	76	-7.820 -14.926	18.535	1.00	0.00	
ATOM	753	C5'	THY	76	-7.116 -16.151	18.596	1.00	0.00	
ATOM	754	C4'	THY	76	-5.769 -15.999	17.890	1.00	0.00	
ATOM	755	04'	THY	76	-5.958 -15.568	16.562	1.00	0.00	
ATOM	756	C1'	THY	76	-4.744 -15.013	16.117	1.00	0.00	
ATOM	757	N1	THY	76	-4.958 -14.223	14.874	1.00	0.00	
ATOM	758	C6	THY	76	-6.056 -13.402	14.751	1.00	0.00	

```
507
                                                                   508
ATOM
        759
             C5
                 THY
                         76
                                 -6.330 -12.770 13.583 1.00 0.00
ATOM
        760
             C7
                 THY
                         76
                                 -7.570 -11.897
                                                  13.577
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 THY
                                 -5.485 -12.929
ATOM
        761
             C4
                         76
                                                  12.414 1.00
                                                                 0.00
                 THY
ATOM
        762
             04
                         76
                                 -5.676 -12.426
                                                  11.310 1.00
                                                                 0.00
                 THY
ATOM
        763
             N3
                         76
                                 -4.393 -13.753
                                                  12.623
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C2
                 THY
                                 -4.075 -14.399
                                                  13.807
ATOM
        764
                         76
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        765
             02
                 THY
                         76
                                 -3.058 -15.086
                                                  13.882
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             C3'
                 THY
                                 -4.858 -14.939
                                                  18.524
                                                          1.00
        766
                         76
                                                                 0.00
             C2'
                 THY
                                 -4.344 -14.151
                                                  17.310
ATOM
        767
                         76
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        768
             03' THY
                         76
                                 -3.852 -15.600
                                                  19.274
                                                          1.00
                                                                 0.00
        769
ATOM
             P
                  ADE
                         77
                                 -2.727 -14.804
                                                  20.116
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        770
             OP1 ADE
                         77
                                 -2.248 -15.686
                                                  21.205
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             OP2 ADE
                         77
                                 -3.251 -13.458
                                                  20.440
                                                          1.00
        771
                                                                 0.00
ATOM
        772
             05' ADE
                         77
                                 -1.560 -14.642
                                                  19.027
                                                           1.00
                                                                 0.00
        773
ATOM
             C5'
                 ADE
                                  -0.909 -15.768
                                                  18.479
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         77
ATOM
        774
             C4'
                  ADE
                         77
                                  0.099 - 15.311
                                                  17.428
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        775
             04'
                  ADE
                         77
                                  -0.592 -14.753
                                                  16.329
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        776
             C1'
                 ADE
                         77
                                  0.211 - 13.758
                                                  15.738
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        777
             N9
                  ADE
                         77
                                  -0.660 - 12.884
                                                  14.919
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        778
             63
                  ADE
                         77
                                  -1.805 -12.238
                                                  15.317
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  ADE
ATOM
        779
             N7
                         77
                                  -2.431 -11.609
                                                  14.365
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        780
             C5
                  ADE
                         77
                                  -1.633 -11.840
                                                  13.253
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  ADE
ATOM
             C6
                                  -1.736 -11.423
                                                  11.915
        781
                         77
                                                           1.00
                                                                 0.00
             N6
                  ADE
ATOM
        782
                         77
                                  -2.734 -10.635
                                                  11.514
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        783
             N1 . ADE
                         77
                                  -0.780 -11.792
                                                  11.040
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C2
ATOM
        784
                 ADE
                         77
                                   0.222 - 12.554
                                                  11.482
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             N3
                 ADE
                                   0.416 -13.039
        785
                         77
                                                  12.708
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             C4
                  ADE
                                                  13.571
        786
                         77
                                  -0.550 -12.619
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        787
             C3'
                 ADE
                         77
                                   1.053 -14.214
                                                  17.931
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C2' ADE
ATOM
        788
                         77
                                   0.756 - 13.052
                                                  16.975
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        789
             03' ADE
                         77
                                   2.375 -14.714
                                                  17.865
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        790
             P
                  GUA
                                                  18.256
                         78
                                   3.658 -13.823
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        791
             OP1 GUA
                         78
                                   4.725 -14.731
                                                  18.730
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP2 GUA
ATOM
        792
                         78
                                   3.220 -12.709
                                                  19.122
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        793
             05'
                 GUA
                         78
                                   4.069 - 13.230
                                                  16.815
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        794
             C5'
                  GUA
                         78
                                   4.394 -14.087
                                                  15.736
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  GUA
ATOM
        795
             C4'
                         78
                                   4.531 -13.288
                                                  14.439
                                                           1.00
                                                                 0.00
             04'
                  GUA
ATOM
        796
                         78
                                   3.327 - 12.608
                                                  14.139
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C1'
                 GUA
                         78
                                   3.636 -11.400
                                                  13.478
ATOM
        797
                                                           1.00
                                                                 0.00
              N9
ATOM
        798
                  GUA
                         78
                                   2.467 -10.492
                                                  13.552
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              68
                  GUA
        799
                         78
                                   1.736 -10.146
                                                  14.661
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        800
              N7
                  GUA
                                   0.662
                                          -9.456
                                                  14.405
                         78
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        801
              C5
                  GUA
                         78
                                   0.691
                                          -9.297
                                                  13.024
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        802
              6
                  GUA
                         78
                                  -0.221
                                          -8.621
                                                  12.159
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        803
              06
                  CUA
                                          -8.035
                                                  12.455
                         78
                                  -1.260
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        804
              N1
                  GUA
                         78
                                   0.170
                                          -8.675
                                                  10.828
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        805
              C2
                  GUA
                         78
                                   1.297
                                          -9.323
                                                  10.371
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        806
              N2
                  GUA
                         78
                                   1.528
                                          -9.289
                                                    9.058
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              N3
                  GUA
                         78
                                          -9.971
        807
                                   2.152
                                                  11.178
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        808
             C4
                  GUA
                                   1.801 -9.916 12.492 1.00 0.00
                         78
```

	509								510
ATOM	809	C3'	GUA	78	5.624	-12.211	14.508	1.00	0.00
ATOM	810	C2'	GUA	78	4.826	-10.917	14.301	1.00	0.00
ATOM	811	03'	GUA	78	6.569	-12.492	13.487	1.00	0.00
ATOM	812	P	GUA	79	7.956	-11.684	13.332	1.00	0.00
ATOM	813	0P1	GUA	79	8.375	-11.203	14.666	1.00	0.00
MOTA	814	0P2	GUA	79	8.888	-12.532	12.550	1.00	0.00
ATOM	815	05'	GUA	79		-10.434	12.427	1.00	0.00
ATOM	816	C5'	GUA	79		-10.610	11.053	1.00	0.00
ATOM	817	C4'	GUA	79	6.627	-9.338	10.463	1.00	0.00
ATOM	818	04'	GUA	79	5.388	-9.030	11.067	1.00	0.00
ATOM	819	C1'	GUA	79	5.153	-7.661	10.838	1.00	0.00
ATOM	820	N9	GUA	79	4.048	-7.178	11.694	1.00	0.00
ATOM	821	C8	GUA	79	3.893	-7.330	13.047	1.00	0.00
ATOM	822	N7	GUA	79	2.786	-6.831	13.518	1.00	0.00
ATOM	823	C5	GUA	79	2.149	-6.313	12.395	1.00	0.00
ATOM	824	C6	GUA	79	0.883	-5.666	12.269	1.00	0.00
ATOM	825	06	GUA	79	0.081	-5.384	13.156	1.00	0.00
ATOM	826	N1	GUA	79	0.572	-5.352	10.950	1.00	0.00
ATOM	827	C2	GUA	79	1.398	-5.607	9.875	1.00	0.00
ATOM	828	N2	GUA	79	0.977	-5.217	8.672	1.00	0.00
ATOM	829	N3	GUA	79	2.595	-6.198	9.990	1.00	0.00
ATOM	830	C4	GUA	79	2.910	-6.532	11.271	1.00	0.00
ATOM	831	C3'	GUA	79	7.496	-8.083	10.651	1.00	0.00
ATOM	832	C2'	GUA	79	6.502	-7.070	11.237	1.00	0.00
ATOM	833	03'	GUA	79	8.026	-7.721	9.387	1.00	0.00
ATOM	834	P	GUA	80	9.012	-6.461	9.180	1.00	0.00
ATOM	835		GUA	80	9.848	-6.717	7.986	1.00	0.00
ATOM	836		GUA	80	9.651	-6.131	10.473	1.00	0.00
ATOM	837	05'	GUA	80	7.968	-5.293	8.817	1.00	0.00
ATOM	838	C5'	GUA	80	7.224	-5.337	7.616	1.00	0.00
ATOM	839	C4'	GUA	80	6.164	-4.237	7.621	1.00	0.00
ATOM	840	04'	GUA	80	5.277	-4.416	8.709	1.00	0.00
ATOM	841	C1'	GUA	. 80	4.825	-3.142	9.097	1.00	0.00
ATOM	842	N9	GUA	80	4.187	-3.184	10.430	1.00	0.00
ATOM	843	C8	GUA	80	4.711	-3.625	11.616	1.00	0.00
ATOM	844	N7	GUA	80	3.913	-3.484	12.637	1.00	0.00
ATOM	845	C5	GUA	80	2.762	-2.929	12.086	1.00	0.00
ATOM	846	C6	GUA	80	1.524		12.700	1.00	0.00
ATOM	847	06	GUA	80	1.218		13.889	1.00	0.00
ATOM	848	N1	GUA	80	0.582		11.775	1.00	0.00
ATOM	849	C2	GUA	80	0.810		10.420	1.00	0.00
ATOM	850	N2	GUA	80	-0.200		9.656	1.00	0.00
ATOM	851	N3	GUA	80	1.985		9.846	1.00	0.00
ATOM	852	C4	GUA	80	2.912		10.729	1.00	0.00
ATOM	853	C3'	GUA	80	6.749		7.791	1.00	0.00
ATOM	854	C2'	GUA	80	6.135		9.109	1.00	0.00
ATOM	855	03'	GUA	80	6.313		6.747	1.00	0.00
ATOM	856	05'	CYT	81	-7.758		14.058	1.00	0.00
ATOM	857	C5'	CYT	81	-7.366		12.866	1.00	0.00
ATOM	858	C4'		81	-6.484		12.022	1.00	0.00

511

859

860

861

862

863

864

865

866

867

868

869

870

871

872

873

874

875

876

877

878

879

880

881

882

883

884

885

886

887

888

889

890

891

892

893

894

895

896

897

898

899

900

901

902

903

904 N3 CYT

905 C2 CYT

906

907

908

02 CYT

C3' CYT

C2' CYT

83

83

83

83

83

-1.790

-1.352

-0.200

-2.975

-2.361 -7.681

-7.616

-7.443

-7.745

-6.898

8.981

7.699

7.395

3.240

1.00

1.00

1.00

1.00

4.405 1.00 0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

ATOM

**ATOM** 

ATOM

ATOM

ATOM

ATOM

ATOM

**ATOM** 

ATOM

**ATOM** 

ATOM

ATOM

ATOM

ATOM

ATOM

ATOM

	513							514
ATOM	909	03'	CYT	83	-2.521 -7.3	322 1.961	1.00	0.00
ATOM	910	P	THY	84	-2.740 -8.8	334 1.423	1.00	0.00
ATOM	911	0P1	THY	84	-3.973 -9.3	391 2.017	1.00	0.00
ATOM	912	0P2	THY	84	-2.559 -8.8	378 -0.047	1.00	0.00
ATOM	913	05'	THY	84	-1.500 -9.6	38 2.049	1.00	0.00
ATOM	914	C5'	THY	84	-0.166 -9.2	224 1.830	1.00	0.00
ATOM	915	C4'	THY	84	0.769 -10.0		1.00	0.00
ATOM	916	04'	THY	84	0.396 -9.9		1.00	0.00
ATOM	917	C1'	THY	84	0.300 -11.2		1.00	0.00
ATOM	918	N1	THY	84	-0.702 -11.3		1.00	0.00
ATOM	919	C6	THY	84	-2.013 -10.8		1.00	0.00
ATOM	920	C5	THY	84	-2.927 -10.7		1.00	0.00
ATOM	921	C7	THY	84	-4.358 -10.4		1.00	0.00
ATOM	922	C4	THY	84	-2.563 -10.8		1.00	0.00
ATOM	923	04	THY	84	-3.329 -10.3		1.00	0.00
ATOM	924	N3	THY	84	-1.239 -11.3		1.00	0.00
ATOM	925	C2	THY	84	-0.282 -11.3		1.00	0.00
ATOM	926	02	THY	84	0.865 -11.		1.00	0.00
ATOM	927	C3'	THY	84	0.661 -11.		1.00	0.00
ATOM	928	C2'	THY	84	-0.129 -12.		1.00	0.00
ATOM	929	03'	THY	84	1.962 -12.		1.00	0.00
ATOM	930	03 P	ADE	85	2.206 -13.		1.00	0.00
ATOM	931		ADE	85				0.00
					3.592 -13.		1.00	
ATOM	932	0FZ 05'	ADE	85 os	1.068 -13.		1.00	0.00
ATOM	933		ADE	85 or	2.116 -14.		1.00	0.00
ATOM	934	C5'	ADE	85 or	3.059 -14.		1.00	0.00
ATOM	935	C4'	ADE	85 05	2.570 -14.		1.00	0.00
ATOM	936	04'	ADE	85 oc	1.335 -14.		1.00	0.00
ATOM	937	C1'	ADE	85 05	0.758 -15.		1:00	0.00
ATOM	938	N9	ADE	85	-0.669 -14.		1.00	0.00
ATOM	939	C8	ADE	85	-1.624 -14.		1.00	0.00
ATOM	940	N7	ADE	85	-2.769 -14.		1.00	0.00
ATOM	941	C5	ADE	85	-2.572 -14.		1.00	0.00
ATOM	942	C6	ADE	85 or	-3.398 -13.		1.00	0.00
ATOM	943	N6	ADE	85 05	-4.641 -13.		1.00	0.00
ATOM	944	N1	ADE	85 05	-2.915 -14.		1.00	0.00
ATOM	945	C2	ADE	· 85	-1.677 -14.		1.00	0.00
ATOM	946	N3	ADE	85 05	-0.788 -14.		1.00	0.00
ATOM	947	C4	ADE	85 85	-1.306 -14.		1.00	0.00
ATOM	948	C3'	ADE	85 85	2.334 -16.		1.00	0.00
ATOM	949	C2'	ADE	85 85	0.936 -16.		1.00	0.00
ATOM	950	03'	ADE	85	3.393 -16.		1.00	0.00
ATOM	951	P	ADE	86	3.462 -18.		1.00	0.00
ATOM	952		ADE	86	4.887 -18.		1.00	0.00
ATOM	953		ADE	86	2.645 -19.		1.00	0.00
ATOM	954			86	2.727 -18.		1.00	0.00
ATOM	955	C5'	ADE	86	3.206 -17.		1.00	0.00
ATOM	956		ADE	86	2.537 -18.		1.00	0.00
ATOM	957	04'		86	1.213 -17.		1.00	0.00
ATOM	958	C1'	ADE	86	0.306 -18.	732 10.487	1.00	0.00

	515							516
ATOM	959	N9	ADE	86	-0.976 -18.429	9.816	1.00	0.00
ATOM	960	C8	ADE	86	-1.232 -18.329	8.470	1.00	0.00
ATOM	961	N7	ADE	86	-2.402 -17.837	8.177	1.00	0.00
ATOM	962	C5	ADE	86	-2.979 -17.623	9.420	1.00	0.00
ATOM	963	С6	ADE	86	-4.231 -17.117	9.814	1.00	0.00
ATOM	964	N6	ADE	86	-5.138 -16.697	8.933	1.00	0.00
ATOM	965	N1	ADE	86	-4.510 -17.044	11.127	1.00	0.00
ATOM	966	C2	ADE	86	-3.599 -17.454	12.004	1.00	0.00
ATOM	967	N3	ADE-	86	-2.378 -17.923	11.766	1.00	0.00
ATOM	968	C4	ADE	86	-2.127 -17.992	10.429	1.00	0.00
ATOM	969	C3'	ADE	86	2.444 -19.715	10.347	1.00	0.00
ATOM	970	C2'	ADE	86	0.991 -19.991	9.961	1.00	0.00
ATOM	971	03'	ADE-	86	2.715 -19.982	11.709	1.00	0.00
ATOM	972		CYT	87	2.939 -21.472	12.276	1.00	0.00
ATOM	973		CYT	87	3.349 -22.344	11.152	1.00	0.00
ATOM	974		CYT	87	3.808 -21.373	13.473	1.00	0.00
ATOM	975	05'	CYT		1.444 -21.878	12.731	1.00	0.00
ATOM	976	C5'	CYT	87	0.865 -21.307	13.890	1.00	0.00
ATOM	977	C4'	CYT	87	-0.662 -21.442	13.922	1.00	0.00
ATOM	978	04'	CYT	87	-1.272 -20.862	12.789	1.00	0.00
ATOM	979	C1'	CYT	87	-2.602 -21.333	12.763	1.00	0.00
ATOM	980	N1	CYT	87	-3.242 -21.074	11.447	1.00	0.00
ATOM	981	C6	CYT	87	-2.560 -21.347	10.289	1.00	0.00
ATOM	982	C5	CYT	87	-3.084 -21.062	9.076	1.00	0.00
ATOM	983	C4	CYT	87	-4.380 -20.451	9.052	1.00	0.00
ATOM	984	N4	CYT	87	-4.908 -20.067	7.892	1.00	0.00
ATOM	985	N3	CYT	87	-5.055 -20.210	10.185	1.00	0.00
ATOM	986	C2	CYT	87	-4.524 -20.526	11.400	1.00	0.00
ATOM	987	02	CYT	87	-5.176 -20.314	12.420	1.00	0.00
ATOM	988	C3'	CYT	87	-1.214 -22:875	13.981	1.00	0.00
ATOM	989	C2'	CYT	87	-2.394 -22.823	13.004	1.00	0.00
ATOM	990	03'	CYT	87	-1.595 -23.153	15.320	1.00	0.00
ATOM	991	P	CYT	88	-2.284 -24.545	15.770	1.00	0.00
ATOM	992	0P1	CYT	88	-1.918 -25.588	14.784	1.00	0.00
ATOM	993	0P2	CYT	88	-1.997 -24.754	17.206	1.00	0.00
ATOM	994		CYT	88	-3.858 -24.228	15.609	1.00	0.00
ATOM	995	C5'	CYT	88	-4.510 -23.273	16.430	1.00	0.00
ATOM	996	C4'	CYT	88	-5.913 -22.972	15.890	1.00	0.00
ATOM	997	04'	CYT	88	-5.821 -22.602	14.529	1.00	0.00
ATOM	998	C1'	CYT	88	-7.023 -22.939	13.873	1.00	0.00
ATOM	999	N1	CYT	88	-6.753 -23.124	12.428	1.00	0.00
ATOM	1000	C6	CYT	88	-5.642 -23.820	12.034	1.00	0.00
ATOM	1001	C5	CYT	88	-5.267 -23.893	10.741	1.00	0.00
ATOM	1002	C4	CYT	88	-6.111 -23.224	9.789	1.00	0.00
ATOM	1003	N4	CYT	88	-5.770 -23.179	8.501	1.00	0.00
ATOM	1004	N3	CYT	88	-7.245 -22.621	10.169	1.00	0.00
ATOM	1005	C2	CYT	88	-7.606 -22.565	11.482	1.00	0.00
ATOM	1006	02	CYT	88	-8.668 -22.042	11.807	1.00	0.00
ATOM	1007	C3'		88	-6.871 -24.172	15.935	1.00	0.00
ATOM	1008	C2'	CYT	88	-7.396 -24.273	14.504	1.00	0.00

	517				(,			518
ATOM	1009	03'	CYT	88	-7.900 -23.919	16.882	1.00	0.00
ATOM	1010	P	CYT	89	-9.101 -24.964	17.175	1.00	0.00
ATOM	1011		CYT	89	-9.551 -24.767	18.571	1.00	0.00
ATOM	1012		CYT	89	-8.674 -26.307	16.723	1.00	0.00
		05'	CYT	89				
ATOM	1013				-10.283 -24.464	16.192	1.00	0.00
ATOM	1014	C5'	CYT	89	-10.973 -23.245	16.418	1.00	0.00
ATOM	1015	C4'	CYT	89	-12.052 -23.023	15.348	1.00	0.00
ATOM	1016	04'	CYT	89	-11.457 -22.987	14.065	1.00	0.00
ATOM	1017	C1'	CYT	89	-12.301 -23.602	13.112	1.00	0.00
ATOM	1018	N1	CYT	89	-11.447 -24.184	12.046	1.00	0.00
ATOM	1019	C6	CYT	89	-10.354 -24.925	12.410	1.00	0.00
ATOM	1020	C5	CYT	89	-9.474 -25.392	11.504	1.00	0.00
ATOM	1021	C4	CYT	89	-9.744 -25.084	10.130	1.00	0.00
ATOM	1022	N4	CYT	89	-8.916 -25.514	9.181	1.00	0.00
ATOM	1023	N3	CYT	89	-10.837 -24.398	9.768	1.00	0.00
ATOM	1024	C2	CYT	89	-11.722 -23.941	10.702	1.00	0.00
ATOM	1025	02	CYT	89	-12.733 -23.341	10.346	1.00	0.00
ATOM	1026	C3'	CYT	89	-13.104 -24.143	15.314	1.00	0.00
ATOM	1027	C2'	CYT	89	-12.972 -24.714	13.907	1.00	0.00
ATOM	1028	03'	CYT	89	-14.390 -23.595	15.575	1.00	0.00
ATOM	1029	P	THY	90	-15.741 -24.488	15.604	1.00	0.00
ATOM	1030		THY	90	-15.367 -25.902	15.824	1.00	0.00
ATOM	1031		THY	90	-16.709 -23.832	16.511	1.00	0.00
ATOM	1032	05'	THY	90	-16.299 -24.352	14.096	1.00	0.00
ATOM	1033	C5'	THY	90	-16.736 -23.106	13.584	1.00	0.00
ATOM	1034	C4'	THY	90	-17.058 -23.226	12.090	1.00	0.00
ATOM	1035	04'	THY	90	-15.927 -23.744	11.416	1.00	0.00
ATOM	1036	C1'	THY	90	-16.333 -24.656	10.419	1.00	0.00
ATOM	1037	N1	THY	90	-15.212 -25.603	10.178	1.00	0.00
ATOM	1038	С6	THY	90	-14.698 -26.326	11.227	1.00	0.00
ATOM	1039	C5	THY	90	-13.585 -27.083	11.086	1.00	0.00
ATOM	1040	С7	THY	90	-13.127 -27.861	12.306	1.00	0.00
ATOM	1041	C4	THY	90	-12.873 -27.146	9.829	1.00	0.00
ATOM	1042	04	THY	90	-11.832 -27.764	9.638	1.00	0.00
ATOM	1043	N3	THY	90	-13.465 -26.417	8.809	1.00	0.00
ATOM	1044	C2	THY	90	-14.628 -25.668	8.912	1.00	0.00
ATOM	1045	02	THY	90	-15.104 -25.122	7.920	1.00	0.00
ATOM	1046	C3'		90	-18.226 -24.179	11.785	1.00	0.00
ATOM	1047	C2'	THY	90	-17.548 -25.336	11.052	1.00	0.00
ATOM	1048	03'	THY	90	-19.181 -23.500	10.985	1.00	0.00
ATOM	1049	P	ADE	91	-20.607 -24.153	10.589	1.00	0.00
ATOM	1050	0P1	ADE	91	-20.974 -25.147	11.621	1.00	0.00
ATOM	1051	0P2	2 ADE	91	-21.541 -23.053	10.264	1.00	0.00
ATOM	1052	05'		91	-20.268 -24.945	9.230	1.00	0.00
ATOM	1053	C5'		91	-20.064 -24.255	8.012	1.00	0.00
ATOM	1054	C4'	ADE	91	-19.516 -25.205	6.944	1.00	0.00
ATOM	1055	04'		91	-18.275 -25.750	7.339	1.00	0.00
ATOM	1056	C1'	ADE	91	-18.046 -26.878	6.528	1.00	0.00
ATOM	1057	N9	ADE	91	-16.995 -27.718	7.131	1.00	0.00
ATOM	1058	C8	ADE	91	-16.881 -28.107	8.439	1.00	0.00

					(201)				付用乙
	519								520
ATOM	1059	N7	ADE	91	-15.782	-28.757	8.711	1.00	0.00
ATOM	1060	C5	ADE	91	-15.140	-28.832	7.478	1.00	0.00
ATOM	1061	C6	ADE	91	·-13.914	-29.386	7.061	1.00	0.00
ATOM	1062	N6	ADE	91	-13.059	-29.964	7.908	1.00	0.00
ATOM	1063	N1	ADE	91	-13.603	-29.351	5.753	1.00	0.00
ATOM	1064	C2	ADE	91	-14.450	-28.778	4.901	1.00	0.00
ATOM	1065	N3	ADE	91	-15.603	-28.177	5.171	1.00	0.00
ATOM	1066	C4	ADE	91	-15.896	-28.240	6.497	1.00	0.00
ATOM	1067	C3'	ADE	91	-20.404	-26.426	6.657	1.00	0.00
ATOM	1068	C2'	ADE	91	-19.395	-27.579	6.575	1.00	0.00
ATOM	1069	03'	ADE	91	-21.120	-26.185	5.455	1.00	0.00
ATOM	1070	P	ADE	92	-22.059	-27.291	4.742	1.00	0.00
ATOM	1071	0P1	ADE	92	-22.494	-28.273	5.759	1.00	0.00
ATOM	1072	0P2	ADE	92	-23.065	-26.582	3.920	1.00	0.00
ATOM	1073	05'	ADE	92	-21.025	-28.024	3.743	1.00	0.00
ATOM	1074	C5'	ADE	92	-20.374		2.711	1.00	0.00
ATOM	1075	C4'	ADE	92		-28.188	2.009	1.00	0.00
ATOM	1076	04'	ADE	92	-18.381		2.947	1.00	0.00
ATOM:	1077	C1'	ADE	92		-30.002	2.663	1.00	0.00
ATOM	1078	N9	ADE	92		-30.656	3.877	1.00	0.00
ATOM	1079	C8	ADE	92		-30.734	5.121	1.00	0.00
ATOM	1080	N7	ADE	92		-31.286	6.032	1.00	0.00
ATOM	1081	C5	ADE	92		-31.609	5.340	1.00	0.00
ATOM	1082	C6	ADE	92		-32.216	5.737	1.00	0.00
ATOM	1083	N6	ADE	92		-32.574	7.002	1.00	0.00
ATOM	1084	N1	ADE	92		-32.412	4.816	1.00	0.00
ATOM	1085	C2	ADE	92		-32.021	3.565	1.00	0.00
ATOM	1086	N3	ADE	92		-31.437	3.065	1.00	0.00
ATOM	1087	C4	ADE	92		-31.249	4.020	1.00	0.00
ATOM	1088	C3'	ADE	92		-29.439	1.357	1.00	0.00
ATOM	1089	C2'		92		-30.550	2.274	1.00	0.00
ATOM	1090	03'	ADE	92		-29.535	0.028	1.00	0.00
ATOM	1091	P	CYT	93		-30.663	-1.007		0.00
ATOM	1092		CYT	93		-31.376		1.00	0.00
ATOM	1093		CYT	93		-30.046	-2.346	1.00	0.00
ATOM	1094	05'		93		-31.674	-1.032	1.00	0.00
ATOM	1095	C5'		93		-31.332	-1.692	1.00	0.00
ATOM	1096	C4'	CYT	93		-32.424	-1.448	1.00	0.00
ATOM	1097	04'	CYT	93		-32.581	-0.059	1.00	0.00
ATOM	1098	C1'	CYT	93		-33.902	0.214	1.00	0.00
ATOM	1099	N1	CYT	93		-34.226	1.616	1.00	0.00
ATOM	1100	C6	CYT	93		-33.864	2.109	1.00	0.00
ATOM	1101	C5	CYT	93		-34.077	3.398	1.00	0.00
ATOM	1101	C4	CYT	93		-34.694	4.235	1.00	0.00
ATOM	1102	N4	CYT	93		-34.842	5.543	1.00	0.00
ATOM	1103	N3	CYT	93		-35.074	3.741	1.00	0.00
ATOM	1104	C2	CYT	93		-34.865	2.434	1.00	0.00
ATOM	1106	02	CYT	93		-35.234	2.005	1.00	0.00
ATOM	1107	C3'	CYT	93		-33.805	-1.956	1.00	0.00
ATOM	1108	C2'	CYT	93		-34.741		1.00	0.00
71 T OIL	1100		011	55	10.710	0 1 1 1 1 1	0.101	1.00	0.00

	521				(202)				村朋 Z U	U
ATOM	1109	03'	CYT	93	-16.127	-34.218	-3.049	1.00	522 0.00	
END										
HEADER	0000	00								
REMARK 0.0000	)()	0.00	0533	1.67511	0.0255	0.01	749 2.	.19618	1.90944	ļ
REMARK		2.85	5314	0.22469	0.4321	9 1.45	679 0	.73946		
REMARK		0.0	1164	0.00357	0.0052	6 0.02	310 0	.00848		
REMARK	0		123	118		4	1	0	(	)
REMARK			1378	305	46	0	273	340		
REMARK		0.0	3896	0.20843	0.0386	6 '0.03	8996 0	.20843	0.12770	)
REMARK		0.0	0000	0.00000						
REMARK	0		0	0		0	0	0	(	)
ATOM	1	N	GLU	1	6.989	-29.745	23.137	1.00	0.00	
ATOM	2	CA	GLU	1		-30.553			0.00	
ATOM	3	CB	GLU	1	9.312	-29.736			0.00	
ATOM	4	CG	GLU	1	9.919	-29.100	22.801	1.00	0.00	
ATOM	5	CD	GLU	1	9.160	-27.856	22.359	1.00	0.00	
ATOM	6	0E1	GLU	1	8.254	-28.031	21.515	1.00	0.00	
ATOM	7	0E2	GLU	1	9.441	-26.779	22.924	1.00	0.00	
ATOM	8	C	GLU	1	7.402	-31.095	25.081	1.00	0.00	
ATOM	9	0	GLU	1	6.262	-31.552	25.030	1.00	0.00	
ATOM	10	N	LYS	2	8.094	-31.007	26.225	1.00	0.00	
ATOM	11	CA	LYS	2		-31.401			0.00	
ATOM	12	CB	LYS	2		-31.328			0.00	
ATOM	13	CG	LYS	2		-32.366			0.00	
ATOM	14	CD	LYS	2		-32.454				
ATOM	15	CE	LYS	2		-31.156				
ATOM	16	NZ	LYS	2		-31.304				
ATOM	17	C	LYS	2		-30.434				
ATOM	18	0	LYS	2		-30.842				
ATOM	19	N	HIS	3		-29.149				
ATOM	20	CA	HIS	3		-28.080				
ATOM	21	CB	HIS HIS	3		-26.764				
ATOM	22		HIS	3		-25.591	27.935			
ATOM	23 24			3 3		-25.301				
ATOM	2 <del>4</del> 25		HIS			-24.206 -22.745				
ATOM ATOM	25 26		HIS	3 3		-23.745 -24.623				
ATOM	20 27		HIS	3		-24.023				
ATOM	28		HIS	3		-28.282				
ATOM	20 29		ARG	3 4		-27.564				
ATOM	29 30		ARG	4		-27.304				
VIOW	30	UH	MIN	4	2.010	411،411	4.300	1.00	0.00	

	523								524
ATO	M 31	CB	ARG	4	1.384	-27.506	25.289	1.00	0.00
ATO	M 32	CG	ARG	4	0.509	-27.663	24.036	1.00	0.00
ATO	M 33	CD	ARG	4	-0.980	-27.641	24.394	1.00	0.00
ATO	M 34	NE	ARG	4	-1.346	-28.767	25.267	1.00	0.00
ATO	M 35	CZ	ARG	4	-2.516	-28.889	25.916	1.00	0.00
ATO		NH1	ARG	4	-3.468	-27.957	25.781	1.00	0.00
ATO			ARG	4		-29.951	26.704	1.00	0.00
ATO		С	ARG	4		-26.092	24.249	1.00	0.00
ATO		0	ARG	4		-25.153	24.221	1.00	0.00
ATO		N	ALA	5		-26.028	23.690	1.00	0.00
ATO		CA	ALA	5		-24.857	22.993	1.00	0.00
ATO		СВ	ALA	5		-24.946	22.933	1.00	0.00
ATO			ALA	5		-24.753	21.598	1.00	0.00
ATO		0	ALA	5		-24.887	20.589	1.00	0.00
ATO		N	ARG	6		-24.512	21.538	1.00	0.00
ATO		CA	ARG	6		-24.388	20.293	1.00	0.00
ATO		СВ	ARG	6		-24.668	20.555	1.00	0.00
ATO		CG	ARG	6		-24.833	19.269	1.00	0.00
ATO		CD	ARG	6		-26.200	18.613	1.00	0.00
ATO			ARG	6		-26.341	17.389	1.00	0.00
ATO		CZ	ARG	6		-27.472	16.667	1.00	0.00
ATO			ARG	6		-28.568	17.068	1.00	0.00
ATO			ARG	6		-27.520	15.545	1.00	0.00
ATO			ARG	6		-23.003	19.685	1.00	0.00
ATO			ARG	. 6		-22.181	19.622	1.00	0.00
ATC			LYS	7		-22.748	19.235	1.00	0.00
ATO			LYS	7		-21.489	18.621	1.00	0.00
ATO			LYS	7		-20.961	19.242	1.00	0.00
ATO			LYS	7		-19.552	18.710	1.00	0.00
ATO			LYS	7		-18.949	19.300	1.00	0.00
ATO			LYS	7		-17.522	18.755	1.00	0.00
ATO	1		LYS	7		-16.870	19.209	1.00	0.00
· ATO			LYS	7		-21.670	17.107	1.00	0.00
ATO			LYS	7		-22.699	16.633	1.00	0.00
ATO			ARG	8		-20.641	16.364	1.00	0.00
ATO		CA	ARG	8	3.936	-20.568	14.913	1.00	0.00
ATO	OM 67	CB	ARG	8	3.287	-19.242	14.491	1.00	0.00
ATO	OM 68	CG	ARG	8	3.659	-18.713	13.101	1.00	0.00
ATO	OM 69	CD	ARG	8	2.924	-17.403	12.771	1.00	0.00
ATO	OM 70	NE	ARG	8	1.507	-17.599	12.414	1.00	0.00
ATO	OM 71	CZ	ARG	8	0.460	-17.608	13.253	1.00	0.00
. ATO	OM 72	NH1	ARG	8	-0.791	-17.699	12.794	1.00	0.00
ATO	OM 73	NH2	ARG	8	0.649	-17.519	14.567	1.00	0.00
ATO	OM 74	C	ARG	8	5.391	-20.678	14.463	1.00	0.00
ATO	OM 75	0	ARG	8	6.275	-20.091	15.088	1.00	0.00
ATO	OM 76	N	GLN	9	5.636	-21.428	13.383	1.00	0.00
ATO	OM 77	CA	GLN	9	6.968	-21.624	12.835	1.00	0.00
ATO	OM 78		GLN	9	7.306	-23.118	12.770	1.00	0.00
ATO			GLN	9	7.506	-23.724	14.164	1.00	0.00
ATO	OM 80	CD	GLN	9	8.027	-25.156	14.066	1.00	0.00

	525							526	
ATOM	81	0E1	GLN	9	7.314 -26.10	05 14.374	1.00	0.00	
ATOM	82	NE2	GLN	9	9.277 -25.3	14 13.624	1.00	0.00	
ATOM	83	C	GLN	9	7.025 -20.99	99 11.446	1.00	0.00	
ATOM	84	0	GLN	9	6.374 -21.48	35 10.523	1.00	0.00	
ATOM	85	N	ALA	10	7.818 -19.93		1.00	0.00	
ATOM	86	CA	ALA	10	7.995 -19.20		1.00	0.00	
ATOM	87	CB	ALA	10	8.861 -18.0		1.00	0.00	
ATOM	88	C .	ALA	10	8.639 -20.2		1.00	0.00	
ATOM	89.	0	ALA	10	9.611 -20.9		1.00	0.00	
ATOM	90	N	TRP	11	8.081 -20.3		1.00	0.00	
ATOM	91	CA	TRP	11	8.551 -21.2		1.00	0.00	*
ATOM	92	CB	TRP	11	7.423 -21.4		1.00	0.00	
ATOM	93	CG	TRP	11	6.218 -22.2		1.00	0.00	
ATOM	94		TRP	11	5.435 -21.9		1.00	0.00	
ATOM	95		TRP	11	4.425 -22.8		1.00	0.00	
ATOM	96		TRP	11	4.503 -23.8		1.00	0.00	
ATOM	97		TRP	11	3.725 -24.9		1.00	0.00	
ATOM	98		TRP	11	4.074 -25.7		1.00	0.00	
ATOM	99		TRP	11	5.186 -25.4		1.00	0.00	
ATOM	100	CE3	TRP	11	5.955 -24.2		1.00	0.00	
ATOM	101	CD2	TRP	11	5.639 -23.4		1.00	0.00	
ATOM	102	C	TRP	11	9.840 -20.7		1.00	0.00	
ATOM	103	0	TRP	11	10.185 -19.5	50 6.310	1.00	0.00	
ATOM	104	N	LEU	12	10.557 -21.5	99 5.448	1.00	0.00	
ATOM	105	CA	LEU	12	11.820 -21.3	20 4.770	1.00	0.00	
ATOM	106	CB	LEU	12	12.952 -21.4	72 5.804	1.00	0.00	
ATOM	107	CG	LEU	12	14.372 -21.1	31 5.321	1.00	0.00	
ATOM	108	CD1	LEU	12	14.482 -19.6	83 4.828	1.00	0.00	
MOTA	109	CD2	LEU	12	15.359 -21.3	43 6.475	1.00	0.00	
ATOM	110	C	LEU	12	11.939 -22.3	12 3.607	1.00	0.00	
ATOM	111	0	LEU	12	11.142 -23.2	49 3.549	1.00	0.00	
ATOM	112	N	TRP	13	12.906 -22.1	29 2.689	1.00	0.00	
ATOM	113	CA	TRP	13	13.107 -23.0	05 1.529	1.00	0.00	
ATOM	114	CB	TRP	13	14.453 -22.8	59 0.817	1.00	0.00	
ATOM	115	CG	TRP	13	15.545 -22.2	83 1.632	1.00	0.00	
ATOM	116		TRP	13	15.836 -20.9	85 1.567	1.00	0.00	
ATOM	117		TRP	13	16.879 -20.6	84 2.416	1.00	0.00	
ATOM	118		TRP	13	17.307 -21.8		1.00	0.00	
ATOM	119		TRP		18.311 -22.0			0.00	
ATOM	120		TRP	13	18.498 -23.3			0.00	
ATOM	121		TRP	13	17.686 -24.4			0.00	
ATOM	122		TRP	13	16.684 -24.1			0.00	
ATOM	123		TRP	13	16.467 -22.8			0.00	
ATOM	124	C	TRP		12.969 -24.4			0.00	
ATOM	125	0	TRP		12.450 -25.1			0.00	
ATOM	126	N	GLU	14	13.424 -24.9			0.00	
ATOM	127	CA	GLU		13.265 -26.4			0.00	
ATOM	128	CB	GLU		13.849 -26.8			0.00	
ATOM	129	CG	GLU		13.963 -28.3			0.00	
ATOM	130	CD	GLU	14	14.473 -28.7	72 6.022	1.00	0.00	

```
527
                                                                   528
                                                   6.652 1.00 0.00
ATOM
        131
             OE1 GLU
                         14
                                 13.790 -29.609
             OE2 GLU
                         14
                                 15.537 -28.247
                                                   6.415 1.00 0.00
ATOM
        132
ATOM
        133
             С
                 GLU
                         14
                                 11.796 -26.807
                                                   2.996
                                                         1.00
                                                                0.00
             0
                 GLU
                                 11.476 -27.667
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        134
                         14
                                                   2.175
ATOM
        135
             N
                 GLU
                         15
                                 10.908 -26.135
                                                   3.723 1.00
                                                                0.00
             CA
                 GLU
                                  9.485 -26.372
                                                   3.636 1.00
                                                                0.00
ATOM
        136
                         15
             CB
                 GLU
                                  8.813 -25.790
                                                          1.00
ATOM
        137
                         15
                                                   4.874
                                                                0.00
             CG
                 GLU
                                  9.415 -26.358
                                                   6.163 1.00
                                                                0.00
ATOM
        138
                         15
        139
             CD
                 GLU
                                  8.463 -26.152
                                                   7.329
                                                          1.00
ATOM
                         15
                                                                0.00
             OE1 GLU
                                  8.029 -24.998
                                                   7.534
                                                          1.00
ATOM
        140
                         15
                                                                0.00
             OE2 GLU
                                  8.147 -27.160
                                                   7.999
                                                          1.00
ATOM
        141
                         15
                                                                0.00
             C
                 GLU
                                  8.895 -25.826
                                                   2.329
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        142
                         15
        143
             0
                 GLU
                                  8.205 -26.556
                                                   1.626
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
                         15
             N
                 ASP
                                  9.147 -24.558
ATOM
        144
                         16
                                                   1.981
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        145
             CA
                 ASP
                         16
                                  8.627 -23.947
                                                   0.758
                                                         1.00
                                                                0.00
             CB
                 ASP
                                  9.152 -22.511
ATOM
        146
                                                   0.608 1.00
                                                                0.00
                         16
ATOM
        147
             CG
                 ASP
                                  8.347 -21.509
                                                   1.414 1.00
                                                                0.00
                         16
ATOM
             OD1 ASP
                                  7.350 -21.002
                                                   0.853 1.00 0.00
        148
                         16
                                                                0.00
ATOM
        149
             OD2 ASP
                         16
                                  8.713 -21.268
                                                   2.582
                                                          1.00
ATOM
        150
             C
                  ASP
                                  9.006 -24.743
                                                  -0.493
                                                         1.00
                                                                0.00
                         16
ATOM
        151
             0
                  ASP
                         16
                                  8.157 -25.011
                                                  -1.342
                                                         1.00
                                                                0.00
             N
                                  10.284 -25.112 -0.611
ATOM
        152
                  LYS
                         17
                                                          1.00
                                                               0.00
                 LYS
ATOM
        153
              CA
                         17
                                  10.816 -25.856
                                                  -1.739
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
              CB
                  LYS
                                 12.355 -25.911
        154
                         17
                                                  -1.658
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        155
              CG
                 LYS
                         17
                                 12.994 -26.594
                                                  -2.875
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
              CD
                 LYS
                                 14.422 -27.090
                                                  -2.581
        156
                         17
                                                          1.00
                                                                0.00
        157
ATOM
              CE
                 LYS
                         17
                                  14.561 -28.021
                                                  -1.360
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        158
              NZ
                  LYS
                         17
                                  13.512 -29.061
                                                  -1.299
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        159
              C
                  LYS
                         17
                                  10.159 -27.240
                                                  -1.745
                                                          1.00
                                                                 0.00
             0
                  LYS
                                  9.667 -27.668
                                                  -2.787
ATOM
         160
                         17
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                  -0.595
ATOM
         161
             N
                  ASN
                         18
                                  10.139 -27.935
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CA
                  ASN
                                  9.517 -29.254
ATOM
         162
                                                  -0.478
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         18
                  ASN
ATOM
        163
              CB
                                  9.557 -29.739
                                                   0.980
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         18
ATOM
        164
              CG ASN
                         18
                                  10.894 -30.362
                                                   1.380
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         165
              OD1 ASN
                         18
                                  11.878 -30.279
                                                   0.643 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         166
              ND2 ASN
                         18
                                  10.938 -31.010
                                                   2.546
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             C
                  ASN
                                  8.064 -29.225
                                                  -0.956
                                                          1.00
         167
                         18
                                                                 0.00
         168
ATOM
             0
                  ASN
                         18
                                   7.664 -30.049
                                                  -1.775
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         169
              N
                  LEU
                         19
                                   7.279 -28.277
                                                  -0.436
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         170
              CA
                 LEU
                         19
                                   5.874 -28.101
                                                  -0.760
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  LEU
ATOM
         171
              CB
                         19
                                   5.293 -26.974
                                                   0.106
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         172
              CG
                 LEU
                         19
                                   3.807 -26.700
                                                  -0.165
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CD1 LEU
                                   2.936 -27.943
                                                   0.038
ATOM
         173
                         19
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CD2 LEU
ATOM
         174
                         19
                                   3.321 -25.566
                                                   0.746
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         175
              С
                  LEU
                         19
                                   5.691 -27.829
                                                  -2.250
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              0
                  LEU
                                   4.898 -28.508
                                                  -2.902
                                                                 0.00
         176
                         19
                                                          1.00
ATOM
         177
              N
                  ARG
                         20
                                   6.420 -26.844
                                                  -2.794
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         178
              CA
                  ARG
                         20
                                   6.328 - 26.500
                                                  -4.205
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         179
              CB
                  ARG
                                   7.249 - 25.321
                                                  -4.546
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             CG
                 ARG
                                   6.877 -24.725 -5.913 1.00 0.00
         180
                         20
```

	E20				(200)
<b>АТОИ</b>	529	CD	ADC.	20	530 7 744 23 510 6 263 1 00 0 00
ATOM ATOM	181 182	CD NE	ARG ARG	20	7.744 -23.510 -6.262 1.00 0.00 9.110 -23.903 -6.642 1.00 0.00
ATOM	183	CZ	ARG	20	
ATOM	184		ARG	20	
	185		ARG	20 20	8.607 -24.388 -8.872 1.00 0.00 10.770 -24.647 -8.082 1.00 0.00
ATOM		C		20	
ATOM Atom	186 187	0	ARG ARG	20	6.619 -27.730 -5.063 1.00 0.00
ATOM	188	N	SER	21	5.884 -27.999 -6.010 1.00 0.00 7.673 -28.483 -4.721 1.00 0.00
ATOM	189	CA	SER	21	7.673 -28.483 -4.721 1.00 0.00 8.045 -29.700 -5.428 1.00 0.00
ATOM	190	CB	SER	21	9.340 -30.284 -4.852 1.00 0.00
ATOM	191	OG	SER	21	10.385 -29.334 -4.909 1.00 0.00
ATOM	192	C	SER	21	6.909 -30.724 -5.349 1.00 0.00
ATOM	193	0	SER	21	6.548 -31.325 -6.358 1.00 0.00
ATOM	194	N	GLY	22	6.344 -30.911 -4.149 1.00 0.00
ATOM	195	CA	GLY	22	5.251 -31.829 -3.888 1.00 0.00
ATOM	196	C	GLY	22	4.063 -31.549 -4.801 1.00 0.00
ATOM	197	0	GLY	22	3.632 -32.431 -5.543 1.00 0.00
ATOM	198	N	VAL	23	3.538 -30.319 -4.758 1.00 0.00
ATOM	199	CA	VAL	23	2.409 -29.934 -5.593 1.00 0.00
ATOM	200	CB	VAL	23	1.894 -28.532 -5.232 1.00 0.00
ATOM	201		VAL	23	0.716 -28.160 -6.146 1.00 0.00
ATOM	202		VAL	23	1.401 -28.494 -3.780 1.00 0.00
ATOM	203	С	VAL	23	2.795 -30.046 -7.069 1.00 0.00
ATOM	204	0	VAL	23	2.014 -30.550 -7.866 1.00 0.00
ATOM	205	N	ARG	24	3.995 -29.599 -7.450 1.00 0.00
ATOM	206	CA	ARG	24	4.440 -29.692 -8.833 1.00 0.00
ATOM	207	CB	ARG	24	5.863 -29.128 -8.980 1.00 0.00
ATOM	208	CG	ARG	24	5.856 -27.632 -9.322 1.00 0.00
ATOM	209	CD	ARG	24	5.949 -27.432 -10.840 1.00 0.00
ATOM	210	NE	ARG	24	4.938 -28.222 -11.560 1.00 0.00
ATOM	211	CZ	ARG	24	5.166 -28.949 -12.665 1.00 0.00
ATOM	212	NH1	ARG	24	6.198 -28.660 -13.464 1.00 0.00
ATOM	213	NH2	ARG	24	4.362 -29.981 -12.953 1.00 0.00
ATOM	214	C	ARG	24	4.399 -31.133 -9.346 1.00 0.00
ATOM	215	0	ARG	24	4.007 -31.367 -10.489 1.00 0.00
ATOM	216	N	LYS	25	4.822 -32.078 -8.503 1.00 0.00
ATOM	217	CA	LYS	25	4.892 -33.490 -8.830 1.00 0.00
ATOM	218	CB	LYS	25	5.834 -34.197 -7.840 1.00 0.00
ATOM	219	CG	LYS	25	7.309 -33.817 -8.035 1.00 0.00
ATOM	220	CD	LYS	25	8.099 -34.865 -8.833 1.00 0.00
ATOM	221	CE	LYS	25	7.554 -35.075 -10.252 1.00 0.00
ATOM	222	NZ	LYS	25	8.383 -36.022 -11.022 1.00 0.00
ATOM	223	C	LYS	25	3.545 -34.205 -8.854 1.00 0.00
ATOM	224	0	LYS	25	3.236 -34.876 -9.837 1.00 0.00
ATOM	225	N	TYR	26	2.781 -34.109 -7.765 1.00 0.00
ATOM	226	CA	TYR	26 26	1.526 -34.836 -7.605 1.00 0.00
ATOM	227	CB	TYR	26 26	1.517 -35.463 -6.201 1.00 0.00
ATOM	228 229	CG	TYR	26 26	2.876 -35.935 -5.714 1.00 0.00 3.595 -36.911 -6.421 1.00 0.00
ATOM Atom	230		TYR	26 26	3.595 -36.911 -6.431 1.00 0.00 4.859 -37.327 -5.977 1.00 0.00
WIOW	430	CEI	NII.	20	4.859 -37.327 -5.977 1.00 0.00

```
531
                                                                   532
ATOM
        231 CZ TYR
                        26
                                  5.407 -36.771 -4.809
                                                         1.00 0.00
ATOM
        232
             OH TYR
                         26
                                  6.635 -37.176 -4.374
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        233 CE2 TYR
                         26
                                  4.692 -35.798 -4.092
                                                         1.00
                                                                0.00
                                                          1.00
ATOM
        234 CD2 TYR
                         26
                                  3.430 -35.383
                                                 -4.545
                                                                0.00
             C
ATOM
        235
                 TYR
                         26
                                  0.273 - 33.988
                                                 -7.827
                                                          1.00
                                                                0.00
                 TYR
ATOM
        236
             0
                         26
                                 -0.742 -34.511 -8.281
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        237
             N
                 GLY
                         27
                                  0.339 - 32.696
                                                 -7.494
                                                          1.00
                                                                0.00
        238 CA
                 GLY
                                                 -7.599
ATOM
                         27
                                 -0.785 -31.769
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        239
             С
                 GLY
                         27
                                 -1.418 -31.533
                                                 -6.226
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        240
             0
                 GLY
                         27
                                 -1.060 -32.190
                                                 -5.249
                                                          1.00
                                                                0.00
                 GLU
ATOM
        241
             N
                         28
                                 -2.372 -30.595
                                                 -6.150
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        242
             CA
                 GLU
                         28
                                 -3.083 -30.298
                                                 -4.914
                                                          1.00
                                                                0.00
                 GLU
ATOM
        243
             CB
                         28
                                 -3.914 -29.012
                                                 -5.064
                                                          1.00
                                                                0.00
                 GLU
ATOM
        244
             CG
                         28
                                 -3.039 -27.748
                                                 -5.110
                                                          1.00
                                                                0.00
                 GLU
ATOM
        245
             CD
                         28
                                 -2.779 -27.223
                                                  -6.514
                                                          1.00
                                                                0.00
             OE1 GLU
ATOM
        246
                         28
                                 -2.589 -28.059
                                                 -7.422
                                                          1.00
                                                                0.00
             OE2 GLU
ATOM
        247
                         28
                                 -2.772 -25.975
                                                  -6.644
                                                          1.00
                                                                0.00
             C
                 GLU
ATOM
        248
                         28
                                 -3.966 -31.488
                                                  -4.516
                                                          1.00
                                                                0.00
             0
                  GLU
                                                  -5.283
ATOM
        249
                         28
                                 -4.146 -32.432
                                                          1.00
                                                                0.00
             N
                  GLY
                                                 -3.298
ATOM
        250
                         29
                                 -4.512 -31.442
                                                          1.00
                                                                0.00
                 GLY
             CA
                                 -5.354 -32.503
                                                  -2.771
ATOM
        251
                         29
                                                          1.00
                                                                0.00
             С
                  GLY
ATOM
        252
                         29
                                 -4.567 -33.790
                                                 -2.535
                                                          1.00
                                                                 0.00
             0
                  GLY
ATOM
        253
                                 -5.125 -34.881
                                                  -2.634
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         29
             N
                  ASN
ATOM
        254
                         30
                                 -3.272 -33.653
                                                 -2.222
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 ASN
                                 -2.347 -34.744 -1.940
ATOM
        255
             CA
                         30
                                                          1.00
                                                                 0.00
        256
             CB
                 ASN
                         30
                                 -1.438 -35.017
                                                 -3.158
ATOM
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        257
             CG
                 ASN
                         30
                                 -2.105 -35.313
                                                  -4.502
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        258
             OD1 ASN
                         30
                                 -1.478 -35.133
                                                  -5.539
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        259
             ND2 ASN
                         30
                                 -3.345 -35.792
                                                 -4.535
                                                          1.00
                                                                 0.00
        260
             C
                  ASN
                                 -1.461 -34.317
                                                  -0.761
ATOM
                         30
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        261
             0
                  ASN
                         30
                                 -0.308 -34.727
                                                  -0.688
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        262
             N
                  TRP
                                 -1.964 -33.471
                                                   0.143
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         31
ATOM
        263
             CA
                 TRP
                         31
                                 -1.205 -32.918
                                                   1.264
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CB
                  TRP
                                 -2.049 -31.881
ATOM
        264
                         31
                                                   2.005
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CG
ATOM
        265
                 TRP
                         31
                                 -2.835 -31.013
                                                   1.078
                                                         1.00
                                                                 0.00
             CD1 TRP
ATOM
        266
                         31
                                  -4.173 -31.055
                                                   0.896
                                                          1.00
                                                                 0.00
             NE1 TRP
                                                                 0.00
ATOM
        267
                         31
                                  -4.538 -30.125
                                                  -0.053
                                                          1.00
ATOM
             CE2 TRP
                                  -3.445 -29.436
                                                  -0.526
                                                                 0.00
        268
                         31
                                                          1.00
ATOM
         269
             CZ2 TRP
                         31
                                  -3.301 -28.418
                                                  -1.475
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             CH2 TRP
                                  -2.019 -27.921
                                                  -1.741
                                                                 0.00
        270
                         31
                                                          1.00
ATOM
        271
             CZ3 TRP
                                  -0.903 -28.437
                                                  -1.065
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         31
ATOM
        272
             CE3 TRP
                         31
                                  -1.060 -29.460
                                                  -0.114
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         273
             CD2 TRP
                                  -2.336 -29.984
                         31
                                                   0.180
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         274
             C
                  TRP
                                  -0.617 -33.994
                                                   2.174
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         31
ATOM
         275
             0
                  TRP
                         31
                                  0.580 - 33.975
                                                   2.452
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         276
             N
                  SER
                         32
                                  -1.446 - 34.942
                                                   2.614
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CA
                  SER
ATOM
         277
                         32
                                  -1.026 -36.067
                                                   3.446
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CB
                  SER
                         32
ATOM
         278
                                  -2.247 -36.978
                                                   3.700 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         279
              OG
                  SER
                         32
                                  -1.917 -38.350
                                                   3.830
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C
                                  0.126 - 36.803
ATOM
         280
                  SER
                         32
                                                   2.753 1.00 0.00
```

```
533
                                                                   534
ATOM
        281
                                  1.139 -37.137
                                                   3.365 1.00 0.00
             0
                 SER
                         32
ATOM
        282
             N
                 LYS
                         33
                                 -0.032 -37.048
                                                   1.451 1.00
                                                                0.00
ATOM
        283 CA
                 LYS
                         33
                                  0.953 - 37.753
                                                   0.647
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        284 CB
                 LYS
                         33
                                  0.368 - 38.093
                                                  -0.734
                                                          1.00
                                                                 0.00
            CG
                 LYS
ATOM
        285
                         33
                                 -1.128 -38.477
                                                  -0.705
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CD
                 LYS
ATOM
        286
                         33
                                 -1.491 -39.533
                                                   0.359
                                                         1.00
                                                                 0.00
             CE
                 LYS
                                 -2.992 -39.517
ATOM
        287
                         33
                                                   0.697
                                                         1.00
                                                                 0.00
ATOM
        288
            NZ
                 LYS
                                 -3.260 -40.133
                         33
                                                   2.013 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        289
             C
                  LYS
                         33
                                  2.254 -36.950
                                                   0.598
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        290
             0
                  LYS
                         33
                                  3.324 -37.503
                                                   0.840
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        291 N
                  ILE
                                  2.158 -35.647
                                                   0.317 1.00
                         34
                                                                 0.00
                                                          1.00
ATOM
        292 CA
                 ILE
                         34
                                  3.278 -34.716
                                                   0.270
                                                                 0.00
                                  2.779 -33.307
ATOM
        293
            CB ILE
                         34
                                                  -0.120
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        294
             CG2 ILE
                                  3.814 -32.220
                                                   0.206
                         34
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        295
             CG1 ILE
                                  2.443 -33.290
                                                  -1.622
                         34
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        296
             CD1 ILE
                                   1.609 -32.080
                                                  -2.059
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         34
ATOM
        297
             C
                  ILE
                                   4.018 -34.755
                                                   1.608
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         34
ATOM
        298
             0
                  ILE
                         34
                                  5.244 -34.764
                                                   1.614
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        299
             N
                  LEU
                         35
                                   3.286 -34.805
                                                   2.729
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        300
             CA
                  LEU
                         35
                                   3.854 -34.894
                                                   4.070
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        301
             CB
                  LEU
                         35
                                   2.712 -34.887
                                                   5.104
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CG
ATOM
        302
                 LEU
                         35
                                   3.095 - 34.459
                                                   6.532
                                                          1.00 0.00
             CD1 LEU
ATOM
        303
                         35
                                   1.847 -34.575
                                                   7.417
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CD2 LEU
ATOM
        304
                         35
                                   4.210 -35.308
                                                   7.152
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C
ATOM
        305
                  LEU
                         35
                                   4.704 - 36.171
                                                    4.154
                                                          1.00
                                                                 0.00
             0
                                   5.834 -36.148
ATOM
        306
                  LEU
                         35
                                                    4.639
                                                           1.00
                                                                0.00
        307
             N
                  LEU
                                   4.175 -37.302
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         36
                                                   3.671
                 LEU
ATOM
        308
             \mathsf{CA}
                                   4.919 -38.556
                                                    3.694
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         36
        309
             CB
                 LEU
                                                                 0.00
ATOM
                         36
                                   4.016 -39.755
                                                    3.356
                                                           1.00
ATOM
        310
             CG
                 LEU
                                   3.351 -40.398
                                                    4.587
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         36
             CD1 LEU
                                   2.350 -39.472
                                                          1.00
ATOM
        311
                         36
                                                    5.284
                                                                 0.00
ATOM
        312
             CD2 LEU
                         36
                                   2.626 -41.681
                                                    4.159
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C
ATOM
        313
                  LEU
                         36
                                   6.147 -38.504
                                                   2.782
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        314
              0
                  LEU
                         36
                                   7.210 - 38.992
                                                    3.165
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             N
                  HIS
                         37
                                   6.029 -37.922
        315
                                                    1.586
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         316
              CA HIS
                         37
                                   7.147 -37.833
                                                    0.661
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         317
              CB
                 HIS
                         37
                                   6.663 -37.333
                                                   -0.710
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CG
                 HIS
ATOM
         318
                         37
                                   5.746 - 38.275
                                                   -1.451
                                                           1.00
                                                                 0.00
              ND1 HIS
ATOM
         319
                         37
                                   6.143 - 39.534
                                                   -1.874
                                                           1.00
                                                                 0.00
         320
              CE1 HIS
                         37
                                   5.094 -40.094
                                                                 0.00
ATOM
                                                  -2.502
                                                           1.00
             NE2 HIS
ATOM
         321
                                   4.022 -39.301
                                                   -2.531
                                                                 0.00
                         37
                                                           1.00
              CD2 HIS
ATOM
         322
                         37
                                   4.440 - 38.154
                                                  -1.865
                                                           1.00
                                                                 0.00
         323
             C
                  HIS
                                   8.238 -36.908
ATOM
                         37
                                                    1.212
                                                           1.00
                                                                 0.00
             0
                  HIS
ATOM
         324
                         37
                                   9.368 -37.341
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                                    1.437
              N
                  TYR
                                   7.887 -35.636
ATOM
         325
                         38
                                                    1.413
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         326
              CA
                 TYR
                         38
                                   8.748 -34.563
                                                    1.882
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         327
              CB
                  TYR
                                   8.509 -33.319
                                                    1.025
                         38
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         328
              CG
                 TYR
                         38
                                   8.808 -33.452
                                                   -0.455
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         329
              CD1 TYR
                         38
                                   7.794 - 33.842
                                                  -1.350
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         330
             CE1 TYR
                                   8.076 -33.958
                         38
                                                  -2.722 1.00 0.00
```

	535								536
ATOM	331	CZ	TYR	38	9.367	-33.683	-3.201	1.00	0.00
ATOM	332	ОН	TYR	38 -	9.631	-33.795	-4.535	1.00	0.00
ATOM	333	CE2	TYR	38	10.381	-33.293	-2.309	1.00	0.00
ATOM	334	CD2	TYR	38	10.101	-33.179	-0.936	1.00	0.00
ATOM	335	C	TYR	38		-34.224	3.328	1.00	0.00
ATOM	336	0	TYR	38		-34.043	3.662	1.00	0.00
ATOM	337	N	LYS	39		-34.139	4.187	1.00	0.00
ATOM	338	CA	LYS	39		-33.846	5.596	1.00	0.00
ATOM	339	СВ	LYS	39		-34.465	6.443	1.00	0.00
ATOM	340	CG	LYS	39		-35.841	7.042	1.00	0.00
ATOM	341	CD	LYS	39		-37.085	6.195	1.00	0.00
ATOM	342	CE	LYS	39		-37.087	4.805	1.00	0.00
ATOM	343	NZ	LYS	39		-38.420	4.182	1.00	0.00
ATOM	344	C	LYS	39		-32.340	5.817	1.00	0.00
ATOM	345	0	LYS	39		-31.525	4.976	1.00	0.00
ATOM	346	N	PHE	40		-32.010	6.961	1.00	0.00
ATOM	347	CA	PHE	40		-30.667	7.418	1.00	0.00
ATOM	348	СВ	PHE			-30.297	6.941	1.00	0.00
ATOM	349	CG	PHE	40		-30.203	5.444	1.00	0.00
ATOM	350		PHE	40		-31.327	4.701	1.00	0.00
ATOM	351		PHE	40		-31.222	3.311	1.00	0.00
ATOM	352	CZ	PHE	40		-29.995	2.660	1.00	0.00
ATOM	353		PHE	40		-28.877	3.406	1.00	0.00
ATOM	354		PHE	40		-28.978	4.793	1.00	0.00
ATOM	355	C	PHE	40 -		-30.659	8.948	1.00	0.00
ATOM	356	0	PHE	40		-31.717	9.576	1.00	0.00
ATOM	357	N	ASN	40		-29.467	9.549	1.00	0.00
ATOM	358		ASN	41			10.993		0.00
ATOM	359	CA CB	ASN	41		-29.270 -27.830	11.345	1.00	0.00
ATOM	360	CG	ASN	41		-27.546	11.080	1.00	0.00
	361	OD1		41		-27.448	12.019	1.00	0.00
ATOM ATOM	362		ASN	41		-27.395	9.812	1.00	0.00
ATOM	363	C	ASN	41		-29.588	11.536	1.00	0.00
ATOM	364		ASN	41		-28.706·		1.00	0.00
ATOM	365	O N	ASN	42		-30.858	11.436	1.00	0.00
ATOM	366	CA	ASN	42		-31.359	11.901	1.00	0.00
ATOM	367	CB	ASN	42		-31.345	13.441	1.00	0.00
ATOM	368	CG	ASN	42		-32.088	14.026	1.00	0.00
ATOM	369		ASN	42		-31.503	14.737	1.00	0.00
ATOM	370		ASN	42		-33.388	13.754	1.00	0.00
ATOM	371	C	ASN	42		-30.616	11.262	1.00	0.00
ATOM	372	0	ASN	42		-30.349	11.915	1.00	0.00
ATOM	373	N	ARG	43		-30.290	9.970	1.00	0.00
ATOM	374	CA	ARG	43		-29.610	9.233	1.00	0.00
ATOM	375	CB	ARG	43		-28.952	7.973	1.00	0.00
ATOM	376	CG	ARG	43		-27.556	8.194	1.00	0.00
ATOM	377	CD	ARG	43		-27.451	9.305	1.00	0.00
ATOM	378	NE	ARG	43		-26.226	9.135	1.00	0.00
ATOM	379	CZ	ARG	43		-25.055	9.772	1.00	0.00
ATOM	380		ARG	43		-24.045	9.482	1.00	0.00
<del></del>									

					(210)			付開としし
	537							538
ATOM		·NH2		43	4.607 -24.892	10.676	1.00	0.00
ATOM	382	C	ARG	43	1.745 -30.637	8.812	1.00	0.00
ATOM	383	0	ARG	43	2.079 -31.625	8.162	1.00	0.00
ATOM	384	N	THR	44	0.487 -30.391	9.173	1.00	0.00
ATOM	385	CA	THR	44	-0.630 -31.254	8.832	1.00	0.00
ATOM	386	CB	THR	44	1.777 -30.980	9.817	1.00	0.00
ATOM	387	CG2	THR	44	-1.352 -31.156	11.279	1.00	0.00
ATOM	388	0G1	THR	44	-2.249 -29.660	9.618	1.00	0.00
ATOM	389	C	THR	44	-1.114 -30.938	7.416	1.00	0.00
ATOM	390	0	THR	44	-0.703 -29.937	6.821	1.00	0.00
ATOM	391	N	SER	45	-2.032 -31.770	6.900	1.00	0.00
ATOM	392	CA	SER	45	-2.648 -31.540	5.602	1.00	0.00
ATOM	393	CB	SER	45	-3.735 -32.583	5.307	1.00	0.00
ATOM	394	0G	SER	45	-3.162 -33.831	4.979	1.00	0.00
ATOM	395	С	SER	45	-3.246 -30.132	5.602	1.00	0.00
ATOM	396	0	SER	45	-3.117 -29.420	4.613	1.00	0.00
ATOM	397	N	VAL	46	-3.871 -29.735	6.723	1.00	0.00
ATOM	398	CA	VAL	46	-4.464 -28.418	6.911	1.00	0.00
ATOM	399	CB	VAL	46	-5.056 -28.267		1.00	0.00
ATOM	400		VAL	46	-5.670 -26.877	8.541	1.00	0.00
ATOM	401		VAL	46	-6.138 -29.313	8.620	1.00	0.00
ATOM	402	C	VAL	46	-3.413 -27.339		1.00	0.00
ATOM	403	0	VAL	46	-3.636 -26.473		1.00	0.00
ATOM	404	N	MET	47	-2.276 -27.378	7.355	1.00	0.00
ATOM	405	CA	MET	47	-1.239 -26.361	7.178	1.00	0.00
ATOM	406	CB	MET	47	-0.051 -26.576	8.128	1.00	0.00
ATOM	407	CG	MET	47	-0.465 -26.726	9.594	1.00	0.00
ATOM	408	SD	MET	47	-1.808 -25.640		1.00	0.00
ATOM	409	CE	MET	47	-2.142 -26.387		1.00	0.00
ATOM	410	C	MET	47	-0.757 -26.261		1.00	0.00
ATOM		0	MET		-0.750 -25.173			
ATOM	411 412	N	LEU	47 48	-0.750 -25.175	5.158 5.144	1.00	0.00 0.00
ATOM	412		LEU	48			1.00	
					0.150 -27.447			0.00
ATOM	414	CB	LEU	48	0.507 -28.905	3.444	1.00	0.00
ATOM	415	CG	LEU	48 40	1.696 -29.388	4.294	1.00	0.00
ATOM	416		LEU	48	1.633 -30.890	4.576	1.00	0.00
ATOM	417		LEU	48	3.032 -29.090	3.615	1.00	0.00
ATOM	418	C	LEU	48	-0.875 -26.867	2.792	1.00	0.00
ATOM	419	0 N	LEU	48	-0.551 -26.003	1.975	1.00	0.00
ATOM	420	N	LYS	49	-2.117 -27.343	2.893	1.00	0.00
MOTA	421	CA	LYS	49	-3.253 -26.937	2.080	1.00	0.00
MOTA	422	CB	LYS	49	-4.451 -27.781	2.544	1.00	0.00
ATOM	423	CG	LYS	49	-5.813 -27.507	1.894	1.00	0.00
ATOM	424	CD	LYS	49	-6.673 -26.494	2.667	1.00	0.00
ATOM	425	CE	LYS	49	-6.950 -26.884	4.125	1.00	0.00
ATOM	426	NZ	LYS	49	-7.991 -26.029	4.721	1.00	0.00
ATOM	427	C	LYS	49	-3.505 -25.430	2.175	1.00	0.00
ATOM	428	0	LYS	49	-3.485 -24.735	1.159	1.00	0.00
ATOM	429	N	ASP	50	-3.756 -24.925	3.386	1.00	
ATOM	430	CA	ASP	50	-4.049 -23.515	3.610	1.00	0.00

```
540
       539
ATOM
        431
             CB
                 ASP
                         50
                                 -4.515 -23.266
                                                  5.043 1.00 0.00
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        432
             CG
                ASP
                         50
                                 -5.881 -23.888
                                                   5.267
ATOM
        433
             OD1 ASP
                         50
                                 -5.997 -24.699
                                                  6.207
                                                          1.00
                                                                0.00
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        434
             OD2 ASP
                         50
                                 -6.794 - 23.585
                                                   4.463
ATOM
        435
             C
                 ASP
                         50
                                 -2.897 -22.609
                                                   3.221
                                                          1.00 0.00
             0
                 ASP
                                 -3.130 - 21.523
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        436
                         50
                                                   2.691
             N
                 ARG
                                 -1.663 -23.045
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        437
                         51
                                                   3.462
             CA
                 ARG
                                 -0.516 -22.248
                                                   3.087
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        438
             CB
                 ARG
                                  0.763 - 22.875
                                                   3.625
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        439
                         51
             CG
                 ARG
                                  1.919 -21.944
                                                   3.264
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        440
                         51
ATOM
             CD
                 ARG
                                  3.133 -22.338
                                                   4.082
                                                         1.00
                                                                0.00
        441
                         51
                 ARG
                                  4.184 -21.328
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             NE
                                                   3.977
        442
                         51
ATOM
        443
             CZ
                 ARG
                                  5.095 -21.208
                                                   3.007 1.00
                                                                0.00
                         51
             NH1 ARG
                                  5.936 -20.174
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
                         51
                                                   3.052
        444
ATOM
        445
             NH2 ARG
                                  5.170 -22.090
                                                   2.006
                                                          1.00
                                                                0.00
                         51
ATOM
             С
                 ARG
                                 -0.468 -22.116
                                                   1.567
                                                          1.00
                                                                0.00
        446
                         51
ATOM
        447
             0
                 ARG
                                 -0.296 -21.018
                                                   1.043
                                                          1.00
                                                                0.00
                         51
             N
                 TRP
                                 -0.631 -23.233
                                                   0.851
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        448
                         52
ATOM
        449
             CA
                 TRP
                         52
                                 -0.623 -23.197
                                                  -0.599
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             CB
                 TRP
                         52
                                 -0.718 -24.608
                                                  -1.166
                                                          1.00
                                                                0.00
        450
ATOM
        451
             CG TRP
                         52
                                 -0.525 -24.684
                                                  -2.646
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CD1 TRP
ATOM
        452
                         52
                                 -1.508 -24.866
                                                  -3.552 1.00
                                                                0.00
ATOM
        453
             NE1 TRP
                         52
                                  -0.978 -24.902
                                                  -4.823
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
              CE2 TRP
                                  0.391 -24.731
                                                  -4.797
                                                          1.00
                                                                0.00
        454
                         52
ATOM
        455
              CZ2 TRP
                         52
                                  1.367 -24.690
                                                  -5.803
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CH2 TRP
                         52
                                  2.710 -24.503
                                                  -5.445
                                                          1.00
                                                                 0.00
        456
ATOM
        457
              CZ3 TRP
                         52
                                  3.057 - 24.359
                                                  -4.090
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                  2.071 -24.398
ATOM
        458
              CE3 TRP
                         52
                                                  -3.088
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CD2 TRP
                                  0.710 - 24.588
                                                  -3.415
                                                                 0.00
ATOM
        459
                         52
                                                          1.00
                                  -1.748 -22.291
ATOM
             С
                  TRP
                         52
                                                 -1.101
                                                          1.00
                                                                 0.00
         460
                                  -1.531 -21.523
                                                                 0.00
ATOM
         461
              0
                  TRP
                         52
                                                  -2.032 1.00
ATOM
              N
                  ARG
                                  -2.934 -22.359
                                                  -0.480
                                                          1.00
                                                                 0.00
         462
                         53
ATOM
                  ARG
                         53
                                  -4.080 -21.524
                                                  -0.826 1.00
                                                                 0.00
         463
              CA
ATOM
              CB
                  ARG
                         53
                                  -5.290 -21.889
                                                   0.048 1.00
                                                                 0.00
         464
ATOM
              CG
                  ARG
                         53
                                  -6.176 -22.974
                                                  -0.580 1.00
                                                                 0.00
         465
ATOM
             CD
                  ARG
                         53
                                  -6.775 -23.929
                                                   0.462 1.00
                                                                0.00
         466
ATOM
                  ARG
         467
              NE
                         53
                                  -7.223 -23.276
                                                   1.708 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         468
              CZ
                  ARG
                         53
                                  -8.189 -22.361
                                                   1.867 1.00
                                                                 0.00
ATOM
              NH1 ARG
                                  -8.985 -22.013
                                                   0.849 1.00
                                                                 0.00
         469
                         53
ATOM
         470
             NH2 ARG
                         53
                                  -8.340 -21.817
                                                   3.080 1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C
                  ARG
                         53
                                  -3.740 -20.041
                                                  -0.663 1.00
                                                                 0.00
         471
ATOM
         472
              0
                  ARG
                         53
                                  -3.769 -19.304
                                                  -1.649
                                                          1.00
                                                                 0.00
              N
                  THR
                                  -3.437 -19.599
                                                   0.568
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         473
                         54
ATOM
         474
              CA
                  THR
                         54
                                  -3.126 -18.201
                                                   0.854
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         475
              CB
                  THR
                         54
                                  -2.804 -17.963
                                                   2.348
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CG2 THR
ATOM
                         54
                                  -1.415 -18.413
                                                   2.802 1.00
                                                                 0.00
         476
              OG1 THR
                                  -2.909 -16.585
                                                    2.640
                                                          1.00
ATOM
         477
                                                                 0.00
                         54
ATOM
         478
              С
                  THR
                         54
                                  -2.036 -17.685
                                                  -0.085
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         479
              0
                  THR
                          54
                                  -2.181 -16.618
                                                  -0.680
                                                          1.00 0.00
                                  -0.950 -18.449 -0.233 1.00 0.00
ATOM
         480
              N
                  MET
                          55
```

```
541
                                                                   542
ATOM
        481
             CA
                 MET
                                  0.142 -18.050 -1.092 1.00 0.00
                         55
ATOM
        482
             CB
                  MET
                         55
                                  1.338 -18.980
                                                  -0.930
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        483
             CG
                 MET
                         55
                                  2.122 -18.720
                                                   0.362
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        484
             SD
                  MET
                         55
                                  3.807 -19.381
                                                   0.352
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        485
            CE
                  MET
                         55
                                  4.544 -18.358
                                                  -0.954
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        486
             С
                  MET
                         55
                                 -0.260 -17.964
                                                  -2.561
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        487
             0
                  MET
                         55
                                 -0.057 -16.914
                                                 -3.161
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        488
             N
                  LYS
                         56
                                 -0.802 -19.030
                                                  -3.165
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        489
             CA
                 LYS
                                 -1.160 -18.987
                                                  -4.580
                         56
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        490
             CB
                  LYS
                         56
                                 -1.550 -20.357
                                                  -5.156
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        491
             CG
                  LYS
                         56
                                 -2.982 -20.845
                                                 -4.891
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        492
             CD
                  LYS
                         56
                                 -3.196 -22.141
                                                  -5.689
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                                 0.00
ATOM
        493
             CE
                  LYS
                         56
                                 -4.447 -22.908
                                                  -5.249
                                                          1.00
ATOM
        494
             NZ
                  LYS
                         56
                                  -4.654 -24.124 -6.063
                                                          1.00
                                                                 0.00
        495
             C
                  LYS
ATOM
                         56
                                 -2.151 -17.865
                                                  -4.895
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        496
             0
                  LYS
                         56
                                 -2.103 -17.287
                                                  -5.978
                                                           1.00
                                                                 0.00
             N
                  LYS
ATOM
        497
                                 -3.037 -17.547 -3.946
                         57
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        498
             CA
                 LYS
                                  -4.012 -16.480
                                                  -4.103
                         57
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CB
                 LYS
        499
                         57
                                 -5.128 -16.645
                                                  -3.059
                                                                 0.00
ATOM
                                                          1.00
ATOM
        500
             CG
                 LYS
                         57
                                  -6.027 -17.866
                                                  -3.315
                                                           1.00
                                                                 0.00
             CD
                  LYS
ATOM
        501
                         57
                                  -6.974 -17.730
                                                  -4.519
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        502
             CE
                 LYS
                         57
                                  -7.922 -16.523
                                                  -4.460
                                                          1.00
                                                                 0.00
             NZ
                 LYS
ATOM
        503
                         57
                                 -8.697 -16.473
                                                  -3.205
                                                                 0.00
                                                          1.00
ATOM
        504
             C
                  LYS
                         57
                                  -3.359 -15.099
                                                  -3.964
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        505
             0
                  LYS
                         57
                                  -3.726 -14.188
                                                  -4.703
                                                          1.00
                                                                 0.00
        506
ATOM
             N
                  LEU
                         58
                                  -2.431 -14.930
                                                  -3.010
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CA
ATOM
        507
                 LEU
                         58
                                  -1.791 -13.648
                                                  -2.719
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                                 0.00
ATOM
        508
             CB
                 LEU
                         58
                                  -1.682 -13.486
                                                  -1.190
                                                           1.00
             CG
                 LEU
ATOM
        509
                         58
                                  -1.768 -12.033
                                                  -0.687
                                                           1.00
                                                                 0.00
             CD1 LEU
ATOM
        510
                         58
                                  -1.693 -12.037
                                                   0.844
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             CD2 LEU
                                                  -1.239
        511
                         58
                                  -0.668 -11.120
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        512
             C
                  LEU
                                  -0.442 -13.423
                                                  -3.415
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         58
             0
ATOM
        513
                  LEU
                         58
                                  -0.306 -12.471
                                                  -4.180
                                                           1.00
                                                                 0.00
             N
ATOM
        514
                  LYS
                         59
                                   0.570 - 14.258
                                                  -3.142
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CA
                  LYS
                                                  -3.694
ATOM
        515
                         59
                                   1.908 -14.089
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CB
                  LYS
                                   2.933 -14.755
                                                  -2.766
                                                                 0.00
        516
                         59
                                                           1.00
              CG
ATOM
        517
                  LYS
                         59
                                   4.325 -14.156
                                                  -2.997
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CD
                  LYS
        518
                         59
                                   5.344 -14.768
                                                  -2.028
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        519
              CE
                 LYS
                                   6.666 -13.992
                                                  -2.025
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         59
ATOM
             NZ
                  LYS
                                                  -3.358
         520
                         59
                                   7.294 - 13.948
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         521
             C
                  LYS
                         59
                                   1.979 -14.618
                                                  -5.124
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         522
             0
                  LYS
                                   2.552 -13.972
                                                  -5.999
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         59
ATOM
         523
             N
                  LEU
                         60
                                   1.379 -15.791
                                                  -5.338
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CA
                 LEU
ATOM
         524
                         60
                                   1.273 -16.482
                                                  -6.608
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         525
              CB
                 LEU
                         60
                                   0.777 - 15.557
                                                   -7.734
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         526
              CG
                  LEU
                                   0.001 -16.289
                         60
                                                  -8.844
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         527
              CD1 LEU
                         60
                                  -0.572 -15.250
                                                  -9.816
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         528
              CD2 LEU
                         60
                                   0.858 - 17.288
                                                  -9.633
                                                           1.00
                                                                 0.00
              \mathbb{C}
ATOM
         529
                  LEU
                          60
                                   2.529 - 17.276
                                                   -6.940
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             0
                  LEU
         530
                         60
                                   3.368 -16.865
                                                  -7.739 1.00 0.00
```

```
543
                                                                  544
                                  2.621 -18.454 -6.321 1.00 0.00
ATOM
        531 N
                 ILE
                        61
                 ILE
                        61
                                  3.709 -19.393 -6.535 1.00 0.00
        532
            CA
ATOM
                 ILE
                                  3.634 -20.543 -5.516
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        533
            CB
                        61
        534 CG2 ILE
                                  4.825 -21.490 -5.741
                                                        1.00
                                                               0.00
                        61
ATOM
ATOM
        535 CG1 ILE
                        61
                                  3.633 -20.015 -4.073 1.00
                                                               0.00
            CD1 ILE
                                  3.133 -21.083 -3.099
                                                         1.00
                                                               0.00
        536
                        61
ATOM
ATOM
        537
             C
                 ILE
                         61
                                  3.581 -19.950 -7.956
                                                         1.00
                                                               0.00
            0
                 ILE
                                  2.561 -20.547 -8.292
                                                                0.00
ATOM
        538
                         61
                                                        1.00
ATOM
        539
             N
                 SER
                         62
                                  4.612 -19.766 -8.787
                                                         1.00
                                                                0.00
        540 CA
                 SER
                         62
                                  4.605 -20.267 -10.154
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
ATOM
             CB
                 SER
                         62
                                  5.699 -19.572 -10.969
                                                         1.00
                                                                0.00
        541
                 SER
                                                                0.00
        542 OG
                         62
                                  5.614 -19.949 -12.328
                                                         1.00
ATOM
        543
             C
                 SER
                         62
                                  4.788 -21.789 -10.151
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
             0
                 SER
                         62
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        544
                                  5.629 -22.316 -9.418
ATOM
        545
             N
                 SER
                         63
                                  4.000 -22.485 -10.975
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
             CA
                 SER
                                  4.024 -23.931 -11.122
                                                         1.00
                                                                0.00
        546
                         63
ATOM
        547
             CB
                 SER
                         63
                                  3.005 -24.564 -10.166
                                                         1.00
                                                                0.00
             0G
                 SER
                                  1.728 -23.986 -10.347
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        548
                         63
                                                                0.00
ATOM
        549
             C
                  SER
                         63
                                  3.703 -24.268 -12.578
                                                         1.00
ATOM
        550
             0
                  SER
                                  2.620 -23.928 -13.052
                                                         1.00
                                                                0.00
                         63
ATOM
        551
             N
                  ASP
                         64
                                  4.634 -24.922 -13.282
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
             CA
                 ASP
                                  4.470 -25.288 -14.684
                                                         1.00
                                                               0.00
        552
                         64
ATOM
        553
             CB
                 ASP
                         64
                                  5.765 -25.866 -15.294
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        554
             CG
                 ASP
                                  7.044 -25.555 -14.518
                                                         1.00
                                                                0.00
                         64
ATOM
        555
             OD1 ASP
                                  7.878 -24.797 -15.051
                                                          1.00
                                                                0.00
                         64
             OD2 ASP
ATOM
        556
                                  7.159 -26.098 -13.395
                                                         1.00
                                                                0.00
                         64
ATOM
        557
             C
                  ASP
                                  3.321 -26.288 -14.838
                                                         1.00
                                                                0.00
                         64
ATOM
        558
             0
                  ASP
                                  3.127 -27.151 -13.981
                                                          1.00
                                                                0.00
                         64
ATOM
        559
             N
                  SER
                         65
                                  2.567 -26.176 -15.935
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         560
             CA
                  SER
                                  1.445 -27.045 -16.256
                                                          1.00
                                                                0.00
                         65
ATOM
         561
             CB
                  SER
                         65
                                  0.251 -26.744 -15.335
                                                          1.00
                                                                0.00
                  SER
ATOM
         562
             0G
                         65
                                 -0.716 -27.772 -15.436
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         563
             C
                  SER
                         65
                                  1.078 -26.848 -17.729
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             0
                  SER
                                  1.786 -26.152 -18.458
                                                         1.00
                                                                0.00
         564
                         65
             N
                  GLU
                                                                0.00
ATOM
         565
                         66
                                 -0.031 -27.459 -18.156
                                                         1.00
ATOM
             CA
                  GLU
                                 -0.538 -27.360 -19.518
                                                          1.00
                                                                0.00
         566
                         66
                  GLU
ATOM
         567
              CB
                         66
                                 -1.499 -28.520 -19.814
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
              CG
                  GLU
                                 -2.726 -28.589 -18.894
         568
                         66
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         569
              CD GLU
                         66
                                 -3.564 -29.820 -19.214
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         570
             OE1 GLU
                         66
                                 -4.481 -29.688 -20.054
                                                          1.00
                                                                0.00
             OE2 GLU
ATOM
         571
                         66
                                 -3.260 -30.882 -18.626
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         572
             C
                  GLU
                         66
                                 -1.168 -25.985 -19.768
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         573
              0
                  GLU
                                 -1.147 -25.500 -20.899
                                                          1.00
                                                                0.00
                         66
ATOM
         574
             N
                  ASP
                                 -1.712 -25.365 -18.714
                                                          1.00
                                                                0.00
                         67
ATOM
         575
              CA
                 ASP
                         67
                                 -2.342 -24.054 -18.725
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         576
              CB
                 ASP
                         67
                                 -3.853 -24.213 -18.932
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
         577
              CG ASP
                         67
                                 -4.569 -22.867 -18.997
                                                          1.00
                                                                0.00
              OD1 ASP
                         67
                                 -4.355 -22.154 -20.003
                                                                0.00
ATOM
         578
                                                          1.00
              OD2 ASP
                                 -5.347 -22.583 -18.060
ATOM
         579
                         67
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         580
              C
                  ASP
                         67
                                 -2.027 -23.383 -17.386 1.00 0.00
```

	EAE							EAC
ATOM	545	OT 1	A C D	C7	1 242 22 220 1	7 440	1 00	546
ATOM	581	0T1		67	-1.342 -22.338 -1			0.00
ATOM	582	0T2		67	-2.074 -24.135 -1		1.00	0.00
ATOM	583	05'		68		0.901	1.00	0.00
ATOM	584		GUA	68		9.846	1.00	0.00
ATOM	585	C4'	GUA	68		8.494	1.00	0.00
ATOM	586	04'	GUA	68		8.426	1.00	0.00
ATOM	587	C1'	GUA	68		7.453	1.00	0.00
ATOM	588	N9	GUA	68	-9.745 -37.894	7.695	1.00	0.00
ATOM	589	C8	GUA	68	-10.145 -37.339	8.884	1.00	0.00
ATOM	590	N7	GUA	68	-11.271 -36.687	8.823	1.00	0.00
ATOM	591	C5	GUA	68	-11.649 -36.807	7.489	1.00	0.00
ATOM	592	C6	GUA	68	-12.802 -36.308	6.811	1.00	0.00
ATOM	593	06	GUA	68	-13.756 -35.694	7.285	1.00	0.00
ATOM	594	N1	GUA	68	-12.776 -36.586	5.449	1.00	0.00
ATOM	595	C2	GUA	68	-11.779 -37.299	4.814	1.00	0.00
ATOM	596	N2	GUA	68	-11.877 -37.474	3.496	1.00	0.00
ATOM	597	N3	GUA	68	-10.716 -37.805	5.455	1.00	0.00
ATOM	598	C4	GUA	68	-10.706 -37.521	6.786	1.00	0.00
ATOM	599	C3'	GUA	68	-6.320 -39.236	8.221	1.00	0.00
ATOM	600	C2'	GUA	68	-7.259 -38.112	7.745	1.00	0.00
ATOM	601	03'	GUA	68	-5.389 -39.704	7.249	1.00	0.00
ATOM	602	P	THY	69	-4.194 -38.794	6.639	1.00	0.00
ATOM	603	0P1	THY	69	-3.341 -39.631	5.761	1.00	0.00
ATOM	604	0P2	THY	69	-3.584 -38.001	7.727	1.00	0.00
ATOM	605	05'	THY	69	-4.996 -37.801	5.675	1.00	0.00
ATOM	606	C5'	THY	69	-5.880 -38.311	4.698	1.00	0.00
ATOM	607	C4°	THY	69	-6.818 -37.221	4.179	1.00	0.00
ATOM	608	04'	THY	69	-7.808 -36.723	5.040	1.00	0.00
ATOM	609	C1'	THY	69	-8.295 -35.537	4.454	1.00	0.00
ATOM	610	N1	THY	69	-9.148 -34.804	5.421	1.00	0.00
ATOM	611	C6.	THY	69	-8.776 -34.732	6.740	1.00	0.00
ATOM	612	C5	THY	69	-9.547 -34.081	7.647	1.00	0.00
ATOM	613	С7	THY	69	-9.021 -34.038	9.070	1.00	0.00
ATOM	614	C4	THY	69	-10.804 -33.464	7.271	1.00	0.00
ATOM	615	04	THY	69	-11.561 -32.855	8.021	1.00	0.00
ATOM	616	N3	THY	69	-11.124 -33.613	5.932	1.00	0.00
ATOM	617	C2	THY	69	-10.350 -34.250	4.976	1.00	0.00
ATOM	618	02	THY	69	-10.730 -34.307	3.810	1.00	0.00
ATOM	619	C3'	THY	69	-6.085 -35.977	3.673	1.00	0.00
ATOM	620	C2'	THY	69	-6.977 -34.830	4.164	1.00	0.00
ATOM	621	03'	THY	69	-5.939 -36.053	2.269	1.00	0.00
ATOM	622	P	THY	70	-5.076 -34.965	1.460	1.00	0.00
ATOM	623	0P1	THY	70	-4.529 -35.617	0.254	1.00	0.00
ATOM	624		THY	70	-4.140 -34.333	2.419	1.00	0.00
ATOM	625	05'	THY	70	-6.192 -33.879	1.030	1.00	0.00
ATOM	626	C5'	THY	70	-7.272 -34.216	0.170	1.00	0.00
ATOM	627	C4'	THY	70	-8.396 -33.174	0.263	1.00	0.00
ATOM	628	04'	THY	70	-8.845 -33.051	1.595	1.00	0.00
ATOM	629	C1'	THY	70	-9.568 -31.844	1.691	1.00	0.00
ATOM	630	N1	THY	70	-9.710 -31.427	3.107	1.00	0.00

```
547
                                                                   548
ATOM
        631
            C6
                 THY
                         70
                                 -8.638 -31.529
                                                   3.957 1.00 0.00
             C5
                 THY
                         70
                                 -8.739 -31.161
                                                   5.257
                                                          1.00
                                                               0.00
ATOM
        632
                 THY
                                 -7.485 -31.340
                                                   6.090
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        633
             С7
                         70
                 THY
                                 -9.977 -30.635
                                                   5.803 1.00
                                                                 0.00
        634 C4
                         70
ATOM
ATOM
        635
             04
                 THY
                         70
                                -10.142 -30.217
                                                   6.946
                                                         1.00
                                                                 0.00
                 THY
                                -11.022 -30.617
                                                   4.896
                                                          1.00
        636
             N3
                         70
                                                                0.00
ATOM
ATOM
        637
             C2
                 THY
                         70
                                -10.934 -30.925
                                                   3.548
                                                          1.00
                                                                0.00
                 THY
ATOM
        638
             02
                         70
                                -11.882 -30.713
                                                   2.799
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C3'
                 THY
                                 -7.985 -31.748
                                                  -0.124
                                                          1.00
ATOM
        639
                         70
                                                                 0.00
             C2' THY
                                                          1.00
        640
                         70
                                 -8.700 -30.866
                                                   0.905
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
        641
             03'
                 THY
                                 -8.364 -31.468
                                                  -1.460
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         70
ATOM
        642
             P
                  ADE
                                 -7.948 -30.093
                                                  -2.203
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         71
ATOM
        643
             OP1 ADE
                         71
                                 -8.133 -30.273
                                                  -3.658
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OP2 ADE
ATOM
        644
                         71
                                  -6.632 -29.663
                                                  -1.680
                                                          1.00
                                                                 0.00
             05' ADE
ATOM
        645
                         71
                                 -9.036 -29.035
                                                  -1.679
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C5'
ATOM
        646
                 ADE
                                -10.383 -29.064
                                                  -2.105
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         71
             C4'
                 ADE
                                -11.175 -27.945
ATOM
        647
                         71
                                                  -1.412
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        648
             04'
                 ADE
                         71
                                -11.466 -28.277
                                                  -0.053
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C1'
                                -11.237 -27.133
ATOM
        649
                 ADE
                         71
                                                   0.744
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N9
ATOM
        650
                  ADE
                         71
                                -11.020 -27.432
                                                   2.177
                                                           1.00
                                                                 0.00
             С8
ATOM
        651
                  ADE
                         71
                                  -9.900 -27.983
                                                   2.733
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N7
                  ADE
ATOM
        652
                         71
                                  -9.859 -27.966
                                                    4.028
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        653
             C5
                  ADE
                         71
                                 -11.060 -27.373
                                                    4.370
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C6
                  ADE
                                -11.598 -27.017
                                                          1.00
        654
                         71
                                                   5.614
                                                                 0.00
                                                   6.748
ATOM
        655
              N6
                  ADE
                         71
                                -10.945 -27.281
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              N1
                  ADE
                                -12.774 -26.370
                                                          1.00
                                                                 0.00
         656
                         71
                                                   5.649
ATOM
         657
              C2
                  ADE
                         71
                                 -13.394 -26.116
                                                    4.494
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         658
              N3
                  ADE
                         71
                                 -12.987 - 26.397
                                                    3.256
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C4
                  ADE
ATOM
         659
                         71
                                 -11.786 -27.037
                                                    3.257
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C3'
                 ADE
         660
                                 -10.393 - 26.617
                                                  -1.364
                                                                 0.00
ATOM
                         71
                                                           1.00
              C2' ADE
ATOM
         661
                         71
                                  -9.937 -26.664
                                                    0.094
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         662
              03'
                 ADE
                                -11.297 -25.564
                                                  -1.623
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         71
             P
                  GUA
ATOM
         663
                         72
                                 -10.860 -24.024
                                                  -1.819
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         664
              OP1 GUA
                         72
                                  -9.570 -23.766
                                                  -1.138
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OP2 GUA
                         72
                                 -11.036 -23.647
                                                  -3.236
                                                                 0.00
ATOM
         665
                                                           1.00
ATOM
              05'
                  GUA
                         72
                                 -12.001 -23.314
                                                  -0.949
                                                           1.00
                                                                 0.00
         666
                  GUA
ATOM
         667
              C5'
                         72
                                 -13.373 -23.498
                                                  -1.238
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         668
              C4'
                  GUA
                         72
                                 -14.214 -22.881
                                                  -0.119
                                                           1.00
                                                                 0.00
              04'
                  GUA
                                 -13.878 -23.504
ATOM
         669
                         72
                                                    1.115
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         670
              C1'
                  GUA
                         72
                                 -13.452 -22.550
                                                    2.069
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              N9
                  GUA
                                 -12.346 -23.106
                                                    2.890
                                                           1.00
                                                                 0.00
         671
                         72
ATOM
         672
              63
                  GUA
                         72
                                 -11.205 -23.726
                                                    2.452
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  GUA
ATOM
         673
              N7
                         72
                                 -10.396 -24.115
                                                    3.399
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         674
              C5
                  GUA
                         72
                                 -11.050 -23.721
                                                    4.562
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         675
              60
                  GUA
                         72
                                 -10.671 -23.886
                                                    5.927
                                                           1.00
                                                                 0.00
         676
              06
                  GUA
                         72
                                  -9.632 -24.378
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
                                                    6.362
              N1
                  GUA
                         72
                                 -11.645 -23.440
ATOM
         677
                                                    6.812
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         678
              C2
                  GUA
                         72
                                 -12.844 -22.871
                                                    6.430 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         679
              N2
                  GUA
                          72
                                 -13.669 -22.457
                                                    7.393
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         680
              N3
                  GUA
                          72
                                 -13.184 -22.676
                                                    5.147 1.00 0.00
```

	549				<b>\</b> ,				550
ATOM	681	C4	GUA	72	_12 255 _4	22 126	4 262	1 00	550
ATOM	682	C3'	GUA	72	-12.255 -2 -13.924 -2		4.262	1.00	0.00
		C2'					0.043	1.00	0.00
ATOM	683		GUA	72 72	-12.949 -2		1.217	1.00	0.00
ATOM	684	03'	GUA	72 72	-15.134 -2		0.313	1.00	0.00
ATOM	685	P	GUA	73	-15.207 -		0.419	1.00	0.00
ATOM	686		GUA	73	-14.024 -		-0.260	1.00	0.00
ATOM	687		GUA	73	-16.566 -		0.023	1.00	0.00
ATOM	688	05'	GUA	73	-15.040 -		2.001	1.00	0.00
ATOM	689	C5'	GUA	73	-16.043 -		2.903	1.00	0.00
ATOM	690	C4'	GUA	73	-15.580 -		4.344	1.00	0.00
ATOM	691	04'	GUA	73	-14.384 -		4.580	1.00	0.00
ATOM	692	C1'	GUA	73	-13.545 -		5.407	1.00	0.00
ATOM	693	N9	GUA	73	-12.145 -		5.290	1.00	0.00
ATOM	694	C8	GUA	73	-11.368 -		4.166	1.00	0.00
ATOM	695	N7	GUA	73	-10.199 -		4.362	1.00	0.00
ATOM	696	C5	GUA	73	-10.184 -		5.731	1.00	0.00
ATOM	697	C6	GUA	73	-9.164 -		6.551	1.00	0.00
ATOM	698	06	GUA	73	-8.056 -		6.204	1.00	0.00
ATOM	699	N1	GUA	73	-9.543 -		7.887	1.00	0.00
ATOM	700	C2	GUA	73	-10.760 -		8.382	1.00	0.00
ATOM	701	N2	GUA	73	-10.965 -	20.738	9.691	1.00	0.00
ATOM	702	N3	GUA	73	-11.713 -	20.057	7.620	1.00	0.00
ATOM	703	C4 <sub>.</sub>	GUA	73	-11.367 -	19.964	6.308	1.00	0.00
ATOM	704	C3'	GUA	73	-15.270 -	17.586	4.672	1.00	0.00
ATOM	705	C2'	GUA	73	-13.747 -	17.615	4.820	1.00	0.00
ATOM	706	03'	GUA	73	-15.945 -	17.244	5.873	1.00	0.00
ATOM	707	P	GUA	74	-15.889 -	15.769	6.530	1.00	0.00
ATOM	708	0P1	GUA	74	-17.265 -	15.372	6.903	1.00	0.00
ATOM	709	0P2	GUA	74	-15.077 -	14.882	5.668	1.00	0.00
ATOM	710	05'	GUA	74	-15.061 -	16.064	7.880	1.00	0.00
ATOM	711	C5'	GUA	74	-15.614 -	16.871	8.905	1.00	0.00
ATOM	712	C4'	GUA	74	-14.627 -	17.068	10.060	1.00	0.00
ATOM	713	04'	GUA	74	-13.438 -	17.668	9.573	1.00	0.00
ATOM	714	C1'	GUA	74	-12.318 -	16.989	10.096	1.00	0.00
ATOM	715	N9	GUA	74	-11.165 -	17.136	9.183	1.00	0.00
ATOM	716	С8	GUA	74	-11.112 -	16.878	7.836	1.00	0.00
ATOM	717	N7	GUA	74	-9.969 -	17.167	7.280	1.00	0.00
ATOM	718	C5	GUA	74	-9.207 -	17.661	8.332	1.00	0.00
ATOM	719	С6	GUA	74	-7.882 -	18.190	8.334	1.00	0.00
ATOM	720	06	GUA	74	-7.127 -	18.329	7.376	1.00	0.00
ATOM	721	N1	GUA	74	-7.470 -	18.594	9.599	1.00	0.00
ATOM	722	C2	GUA	74	-8.257 -	18.529	10.732	1.00	0.00
ATOM	723	N2	GUA	74	-7.718 -		11.889	1.00	0.00
ATOM	724	N3	GUA	74	-9.508 -		10.728	1.00	0.00
ATOM	725	C4	GUA	74	-9.926 -		9.503	1.00	0.00
ATOM	726	C3'	GUA	74	-14.203 -	15.757	10.742	1.00	0.00
ATOM	727	C2'	GUA	74	-12.808 -		10.156	1.00	0.00
ATOM	728	03'	GUA	74	-14.182 -		12.147	1.00	0.00
ATOM	729	P	THY	75	-13.816 -		13.205	1.00	0.00
ATOM	730	0P1	THY	75	-13.649 -	13.525	12.477	1.00	0.00

ATOM 732 05° THY 75		551							552	
ATOM 733 CS THY 75 -12.223 -16.457 14.495 1.00 0.00 ATOM 735 C4 THY 75 -10.761 -16.673 14.894 1.00 0.00 ATOM 736 C1 THY 75 -9.962 -16.742 13.726 1.00 0.00 ATOM 737 N1 THY 75 -8.788 -15.965 13.899 1.00 0.00 ATOM 737 N1 THY 75 -8.282 -15.540 12.569 1.00 0.00 ATOM 738 C6 THY 75 -9.098 -14.862 11.691 1.00 0.00 ATOM 739 C5 THY 75 -9.098 -14.862 11.691 1.00 0.00 ATOM 740 C7 THY 75 -9.638 -13.746 9.578 1.00 0.00 ATOM 740 C7 THY 75 -9.638 -13.746 9.578 1.00 0.00 ATOM 740 C7 THY 75 -6.932 -14.770 8.823 1.00 0.00 ATOM 742 C4 THY 75 -6.932 -14.770 8.823 1.00 0.00 ATOM 744 C2 THY 75 -6.936 -15.905 12.199 1.00 0.00 ATOM 744 C2 THY 75 -6.966 -15.905 12.199 1.00 0.00 ATOM 746 C3 THY 75 -9.493 -16.600 10.903 1.00 0.00 ATOM 747 C2 THY 75 -9.493 -16.650 16.850 1.00 0.00 ATOM 748 O3 THY 75 -9.493 -16.650 16.850 1.00 0.00 ATOM 748 O3 THY 75 -9.493 -16.505 16.850 1.00 0.00 ATOM 750 0P1 THY 76 -8.847 -15.106 17.990 1.00 0.00 ATOM 751 0P2 THY 76 -8.847 -15.106 17.990 1.00 0.00 ATOM 752 O5 THY 76 -8.847 -15.106 17.990 1.00 0.00 ATOM 752 O5 THY 76 -7.293 -15.099 17.574 1.00 0.00 ATOM 753 C5 THY 76 -8.870 -15.795 19.293 1.00 0.00 ATOM 750 OF THY 76 -7.293 -15.099 17.574 1.00 0.00 ATOM 750 OF THY 76 -6.476 -16.226 17.769 1.00 0.00 ATOM 750 OF THY 76 -6.476 -16.226 17.769 1.00 0.00 ATOM 750 OF THY 76 -6.476 -16.226 17.769 1.00 0.00 ATOM 755 O4 THY 76 -6.476 -16.226 17.769 1.00 0.00 ATOM 755 O4 THY 76 -6.418 -18.918 11.937 1.00 0.00 ATOM 750 OF THY 76 -6.418 11.5533 1.00 0.00 ATOM 750 O7 THY 76 -6.188 11.937 1.00 0.00 ATOM 750 O7 THY 76 -7.293 -15.099 17.574 1.00 0.00 ATOM 750 O7 THY 76 -6.188 11.938 1.00 0.00 ATOM 750 O7 THY 76 -6.188 11.938 1.00 0.00 ATOM 750 O7 THY 76 -6.188 11.938 1.00 0.00 ATOM 750 O7 THY 76 -6.188 11.938 1.00 0.00 ATOM 750 O7 THY 76 -7.293 -15.099 17.574 1.00 0.00 ATOM 750 O7 THY 76 -7.293 -15.099 17.574 1.00 0.00 ATOM 750 O7 THY 76 -6.188 11.938 1.00 0.00 ATOM 750 O7 THY 76 -7.293 -15.099 1.00 0.00 ATOM 750 O7 THY 76 -7.293 -15.099 1.00 0.00 ATOM 750 O7 THY 76 -7.293 -15.099 1.00 0.00 ATOM 750 O7 THY 76 -7.293 -15.0	ATOM		0P2	THY	75	-14.769 -14.884	14.334	1.00		
ATOM 733 CS' THY 75 -12.223 -16.457 14.495 1.00 0.00 ATOM 735 C4' THY 75 -10.761 -16.673 14.894 1.00 0.00 ATOM 736 C1' THY 75 -9.962 -16.742 13.726 1.00 0.00 ATOM 737 N1 THY 75 -8.788 -15.965 13.899 1.00 0.00 ATOM 738 C6 THY 75 -8.6882 -15.540 12.569 1.00 0.00 ATOM 738 C6 THY 75 -9.098 -14.862 11.691 1.00 0.00 ATOM 739 C5 THY 75 -9.098 -14.862 11.691 1.00 0.00 ATOM 740 C7 THY 75 -9.638 -13.746 9.578 1.00 0.00 ATOM 740 C7 THY 75 -9.638 -13.746 9.578 1.00 0.00 ATOM 740 C7 THY 75 -6.932 -14.770 8.823 1.00 0.00 ATOM 742 C4 THY 75 -6.932 -14.770 8.823 1.00 0.00 ATOM 743 C2 THY 75 -6.966 -15.905 12.199 1.00 0.00 ATOM 744 C2 THY 75 -6.966 -15.905 12.199 1.00 0.00 ATOM 746 C3' THY 75 -6.966 -15.905 12.199 1.00 0.00 ATOM 747 C2' THY 75 -9.493 -16.650 16.850 1.00 0.00 ATOM 748 C3' THY 75 -9.493 -16.650 16.850 1.00 0.00 ATOM 748 C3' THY 75 -9.493 -16.650 16.850 1.00 0.00 ATOM 750 OPI THY 76 -8.847 -15.106 17.990 1.00 0.00 ATOM 751 OP2 THY 76 -8.847 -15.106 17.990 1.00 0.00 ATOM 752 C5' THY 76 -8.847 -15.106 17.990 1.00 0.00 ATOM 752 C5' THY 76 -7.293 -15.099 17.574 1.00 0.00 ATOM 753 C5' THY 76 -8.870 -15.795 19.293 1.00 0.00 ATOM 750 C1' THY 76 -8.870 -15.795 19.293 1.00 0.00 ATOM 750 C1' THY 76 -6.476 -16.226 17.769 10.00 0.00 ATOM 750 C1' THY 76 -6.472 -14.282 -14.611 15.553 1.00 0.00 ATOM 750 C1' THY 76 -5.065 -15.957 17.247 1.00 0.00 ATOM 750 C1' THY 76 -6.108 -12.283 11.00 0.00 ATOM 750 C1' THY 76 -5.065 -15.957 17.247 1.00 0.00 ATOM 750 C1' THY 76 -6.108 -12.283 11.00 0.00 ATOM 750 C2' THY 76 -6.108 -12.283 11.00 0.00 ATOM 750 C2' THY 76 -6.108 -12.283 11.00 0.00 ATOM 750 C1' THY 76 -6.108 -12.283 11.01 1.00 0.00 ATOM 750 C2' THY 76 -7.293 -15.095 17.274 1.00 0.00 ATOM 750 C2' THY 76 -6.108 -12.283 11.01 1.00 0.00 ATOM 750 C2' THY 76 -6.108 -12.283 11.00 0.00 ATOM 750 C3' THY 76 -7.293 -15.095 11.00 0.00 ATOM 750 C3' THY 76 -7.293 -15.095 11.00 0.00 ATOM 760 C3' THY 76 -7.293 -15.095 11.00 0.00 ATOM 779 C5' ADE 77 -2.2500 -12.888 18.945 1.00 0.00 ATOM 760 C3' THY 76 -3.803 -14.290 13.140 10.00 0.00 ATOM 767 C2' THY	ATOM	732	05'	THY	75	-12.368 -15.272	13.733	1.00	0.00	
ATOM 735 04' THY 75		733	C5'	THY	75	-12.223 -16.457	14.495	1.00	0.00	
ATOM 736 C1 THY 75										
ATOM 736 C1' THY 75			04'						0.00	
ATOM 738 C6 THY 75										
ATOM 738 C6 THY 75										
ATOM 740 C7 THY 75										
ATOM 740 C7 THY 75										
ATOM 741 C4 THY 75										
ATOM 742 04 THY 75										
ATOM 743 N3 THY 75										
ATOM 744 C2 THY 75										
ATOM 745 02 THY 75										
ATOM 746 C3' THY 75										
ATOM 747 C2' THY 75										
ATOM 748 03' THY 75										
ATOM 749 P THY 76										
ATOM 750 OP1 THY 76										
ATOM 751 0P2 THY 76										
ATOM 752 05' THY 76										
ATOM 753 C5' THY 76										
ATOM 754 C4' THY 76										
ATOM 755 04' THY 76										
ATOM 756 C1' THY 76										
ATOM 757 N1 THY 76										
ATOM 758 C6 THY 76										
ATOM 759 C5 THY 76										
ATOM 760 C7 THY 76										
ATOM 761 C4 THY 76										
ATOM 762 04 THY 76										
ATOM 763 N3 THY 76										
ATOM 764 C2 THY 76										
ATOM 765 02 THY 76										
ATOM 766 C3' THY 76										
ATOM 767 C2' THY 76										
ATOM 768 03' THY 76										
ATOM 769 P ADE 77 -2.125 -14.109 19.111 1.00 0.00 ATOM 770 0P1 ADE 77 -2.500 -12.688 18.945 1.00 0.00 ATOM 771 0P2 ADE 77 -2.077 -14.715 20.458 1.00 0.00 ATOM 772 05 ADE 77 -0.706 -14.336 18.392 1.00 0.00 ATOM 773 C5 ADE 77 -0.142 -15.628 18.286 1.00 0.00 ATOM 774 C4 ADE 77 0.748 -15.694 17.044 1.00 0.00 ATOM 775 04 ADE 77 0.022 -15.197 15.929 1.00 0.00 ATOM 776 C1 ADE 77 0.789 -14.242 15.221 1.00 0.00 ATOM 777 N9 ADE 77 -0.125 -13.279 14.562 1.00 0.00 ATOM 778 C8 ADE 77 -1.255 -12.701 15.085 1.00 0.00 ATOM 779 N7 ADE 77 -1.963 -12.026 14.223 1.00 0.00										
ATOM 770 OP1 ADE 77 -2.500 -12.688 18.945 1.00 0.00 ATOM 771 OP2 ADE 77 -2.077 -14.715 20.458 1.00 0.00 ATOM 772 O5' ADE 77 -0.706 -14.336 18.392 1.00 0.00 ATOM 773 C5' ADE 77 -0.142 -15.628 18.286 1.00 0.00 ATOM 774 C4' ADE 77 0.748 -15.694 17.044 1.00 0.00 ATOM 775 O4' ADE 77 0.022 -15.197 15.929 1.00 0.00 ATOM 776 C1' ADE 77 0.789 -14.242 15.221 1.00 0.00 ATOM 777 N9 ADE 77 -0.125 -13.279 14.562 1.00 0.00 ATOM 778 C8 ADE 77 -1.255 -12.701 15.085 1.00 0.00 ATOM 779 N7 ADE 77 -1.963 -12.026 14.223 1.00 0.00										
ATOM 771 OP2 ADE 77 -2.077 -14.715 20.458 1.00 0.00 ATOM 772 05' ADE 77 -0.706 -14.336 18.392 1.00 0.00 ATOM 773 C5' ADE 77 -0.142 -15.628 18.286 1.00 0.00 ATOM 774 C4' ADE 77 0.748 -15.694 17.044 1.00 0.00 ATOM 775 04' ADE 77 0.022 -15.197 15.929 1.00 0.00 ATOM 776 C1' ADE 77 0.789 -14.242 15.221 1.00 0.00 ATOM 777 N9 ADE 77 -0.125 -13.279 14.562 1.00 0.00 ATOM 778 C8 ADE 77 -1.255 -12.701 15.085 1.00 0.00 ATOM 779 N7 ADE 77 -1.963 -12.026 14.223 1.00 0.00										
ATOM 772 05' ADE 77 -0.706 -14.336 18.392 1.00 0.00 ATOM 773 C5' ADE 77 -0.142 -15.628 18.286 1.00 0.00 ATOM 774 C4' ADE 77 0.748 -15.694 17.044 1.00 0.00 ATOM 775 04' ADE 77 0.022 -15.197 15.929 1.00 0.00 ATOM 776 C1' ADE 77 0.789 -14.242 15.221 1.00 0.00 ATOM 777 N9 ADE 77 -0.125 -13.279 14.562 1.00 0.00 ATOM 778 C8 ADE 77 -1.255 -12.701 15.085 1.00 0.00 ATOM 779 N7 ADE 77 -1.963 -12.026 14.223 1.00 0.00										
ATOM 773 C5 ADE 77 -0.142 -15.628 18.286 1.00 0.00 ATOM 774 C4 ADE 77 0.748 -15.694 17.044 1.00 0.00 ATOM 775 04 ADE 77 0.022 -15.197 15.929 1.00 0.00 ATOM 776 C1 ADE 77 0.789 -14.242 15.221 1.00 0.00 ATOM 777 N9 ADE 77 -0.125 -13.279 14.562 1.00 0.00 ATOM 778 C8 ADE 77 -1.255 -12.701 15.085 1.00 0.00 ATOM 779 N7 ADE 77 -1.963 -12.026 14.223 1.00 0.00										
ATOM 774 C4' ADE 77 0.748 -15.694 17.044 1.00 0.00 ATOM 775 04' ADE 77 0.022 -15.197 15.929 1.00 0.00 ATOM 776 C1' ADE 77 0.789 -14.242 15.221 1.00 0.00 ATOM 777 N9 ADE 77 -0.125 -13.279 14.562 1.00 0.00 ATOM 778 C8 ADE 77 -1.255 -12.701 15.085 1.00 0.00 ATOM 779 N7 ADE 77 -1.963 -12.026 14.223 1.00 0.00										
ATOM 775 04' ADE 77 0.022 -15.197 15.929 1.00 0.00 ATOM 776 C1' ADE 77 0.789 -14.242 15.221 1.00 0.00 ATOM 777 N9 ADE 77 -0.125 -13.279 14.562 1.00 0.00 ATOM 778 C8 ADE 77 -1.255 -12.701 15.085 1.00 0.00 ATOM 779 N7 ADE 77 -1.963 -12.026 14.223 1.00 0.00										
ATOM 776 C1' ADE 77 0.789 -14.242 15.221 1.00 0.00 ATOM 777 N9 ADE 77 -0.125 -13.279 14.562 1.00 0.00 ATOM 778 C8 ADE 77 -1.255 -12.701 15.085 1.00 0.00 ATOM 779 N7 ADE 77 -1.963 -12.026 14.223 1.00 0.00										
ATOM 777 N9 ADE 77 -0.125 -13.279 14.562 1.00 0.00 ATOM 778 C8 ADE 77 -1.255 -12.701 15.085 1.00 0.00 ATOM 779 N7 ADE 77 -1.963 -12.026 14.223 1.00 0.00										
ATOM 778 C8 ADE 77 -1.255 -12.701 15.085 1.00 0.00 ATOM 779 N7 ADE 77 -1.963 -12.026 14.223 1.00 0.00										
ATOM 779 N7 ADE 77 -1.963 -12.026 14.223 1.00 0.00										
ATUM 180 C5 ADE 11 -1.231-12.134 13.048 1.00 0.00										•
	ATOM	780	C5	ADE	77	-1.231 -12.134	13.048	1.00	0.00	

	553				(270)				554
ATOM	781	C6	ADE	77	_1 /39	-11.639	11.746	1.00	0.00
ATOM	782	N6	ADE	77		-10.939			
ATOM	783	N1	ADE	77		-11.864		1.00	0.00
	784						10.807	1.00	0.00
ATOM		C2	ADE	77 77		-12.580	11.139	1.00	0.00
ATOM	785	N3	ADE	77 77		-13.155	12.306	1.00	0.00
ATOM	786	C4	ADE	77 		-12.874	13.245	1.00	0.00
ATOM	787	C3'	ADE	77		-14.859	17.125	1.00	0.00
ATOM	788	C2'	ADE	77		-13.618	16.316	1.00	0.00
ATOM	789	03'	ADE	77		-15.613		1.00	0.00
ATOM	790	P	GUA	78		-15.420		1.00	0.00
ATOM	791		GUA	78		-16.455	16.212	1.00	0.00
ATOM	792		GUA	78	4.690	-15.307	18.382	1.00	0.00
ATOM	793	05'	GUA	78	4.937	-13.991	16.270	1.00	0.00
ATOM	794	C5'	GUA	78	5.619	-13.868	15.039	1.00	0.00
ATOM	795	C4'	GUA	78	5.604	-12.407	14.587	1.00	0.00
ATOM	796	04'	GUA	78	4.291	-12.009	14.252	1.00	0.00
ATOM	797	C1'	GUA	78	4.230	-10.607	14.366	1.00	0.00
ATOM	798	N9	GUA	78	2.815	-10.164	14.313	1.00	0.00
ATOM	799	C8	GUA	78	1.812	-10.327	15.239	1.00	0.00
ATOM	800	N7	GUA	78	0.638	-9.933	14.832	1.00	0.00
ATOM	801	C5	GUA	78		-9.454	13.549	1.00	0.00
ATOM	802	C6	GUA	78	-0.023	-8.863	12.607	1.00	0.00
ATOM	803	06	GUA	78	-1.224	-8.634	12.732	1.00	0.00
ATOM	804	N1	GUA	78	0.615	-8.512	11.424	1.00	0.00
ATOM	805	C2	GUA	78	1.957	-8.698	11.172	1.00	0.00
ATOM	806	N2	GUA	78	2.427	-8.315	9.984	1.00	0.00
ATOM	807	N3	GUA	78	2.801	-9.245	12.055	1.00	0.00
ATOM	808	C4	GUA	78	2.201	-9.594	13.224	1.00	0.00
ATOM	809	C3'	GUA	78		-11.418	15.675	1.00	0.00
ATOM	810	C2'	GUA	78		-10.389		1.00	0.00
ATOM	811	03'	GUA	78		-10.895	15.313	1.00	0.00
ATOM	812	P	GUA	79		-9.898	16.276	1.00	0.00
ATOM	813		GUA	79		-10.048	15.969	1.00	0.00
ATOM	814		GUA	79		-10.061	17.665	1.00	0.00
ATOM	815	05'	GUA	79	7.670	-8.468	15.730	1.00	0.00
ATOM	816	C5'	GUA	79	8.026	-8.033	14.433	1.00	0.00
ATOM	817	C4'	GUA	79	7.136	-6.867	14.009	1.00	0.00
ATOM	818	04'	GUA	79	5.772	-7.233	14.003	1.00	0.00
ATOM	819	C1'	GUA	79	5.025	-6.044	14.122	1.00	0.00
ATOM	820	N9	GUA	79	3.637	-6.324	14.552	1.00	0.00
ATOM	821	C8	GUA	79 79	3.216	-6.996	15.672	1.00	0.00
ATOM	822	N7	GUA	79	1.921	-7.063	15.801	1.00	0.00
ATOM	823	C5	GUA	79 79	1.439	-6.414		1.00	0.00
ATOM	824	C6	GUA	79 79	0.096	-6.190	14.669 14.238	1.00	0.00
ATOM	825	06	GUA	79 79	-0.951				
						-6.472 -5.570	14.817	1.00	0.00
ATOM	826	N1	GUA	79 70	0.033	-5.579 -5.106	12.991	1.00	0.00
ATOM	827	C2	GUA	79 70	1.133	-5.196 -4.622	12.253	1.00	0.00
ATOM	828	N2	GUA	79 70	0.905	-4.633	11.066	1.00	0.00
ATOM	829	N3	GUA	79 70	2.396	-5.370	12.671	1.00	0.00
ATOM	830	C4	GUA	79	2.482	-5.990	13.880	1.00	0.00

```
555
                                                                   556
                                        -5.624 14.901 1.00 0.00
ATOM
        831 C3' GUA
                         79
                                  7.270
                         79
             C2'
                                  5.806
                                         -5.238
                                                  15.158
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        832
                 GUA
        833
             03'
                 GUA
                         79
                                  8.024
                                         -4.648
                                                  14.199
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             P
                  GUA
                         80
                                  8.363
                                         -3.190
                                                  14.806
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        834
ATOM
        835
             OP1 GUA
                         80
                                  8.273
                                         -3.248
                                                  16.281
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP2 GUA
                                  9.596
                                         -2.692
                                                 14.159
                                                           1.00
                                                                 0.00
        836
                         80
ATOM
ATOM
        837
             05'
                 GUA
                                  7.129
                                          -2.317
                                                  14.257
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         80
             C5'
                 GUA
                                   6.958 -2.101
                                                  12.870
                                                           1.00
                                                                 0.00
        838
                         80
ATOM
ATOM
        839
             C4'
                  GUA
                         80
                                   5.581
                                         -1.493
                                                  12.604
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        840
             04'
                 GUA
                         80
                                   4.575
                                         -2.345
                                                  13.114
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                         -1.537
ATOM
        841
             C1'
                  GUA
                         80
                                   3.519
                                                  13.572
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N9
                  GUA
                                   2.623
                                         -2.288
                                                  14.474
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        842
                         80
                  GUA
                                         -2.925
ATOM
        843
             С8
                         80
                                   2.930
                                                  15.648
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  GUA
                                   1.901
                                         -3.431
                                                                 0.00
             N7
                         80
                                                  16.267
                                                           1.00
ATOM
        844
ATOM
        845
              C5
                  GUA
                         80
                                   0.830
                                          -3.121
                                                  15.436
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C6
                  GUA
                                  -0.562 -3.399
                                                  15.582
                                                           1.00
                                                                 0.00
        846
                         80
ATOM
        847
              06
                  GUA
                         80
                                  -1.132 -3.965
                                                  16.512
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              N1
                  GUA
                         80
                                  -1.304
                                          -2.961
                                                  14.492
                                                          1.00
                                                                 0.00
        848
                                         -2.306
ATOM
        849
              C2
                  GUA
                          80
                                  -0.783
                                                  13.397
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                  -1.634 -1.929
ATOM
        850
              N2
                  GUA
                                                  12.441
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          80
ATOM
        851
              N3
                  GUA
                          80
                                   0.518 - 2.011
                                                  13.273
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              C4
                  GUA
                          80
                                   1.269
                                          -2.449
                                                  14.319
                                                           1.00
                                                                 0.00
        852
ATOM
         853
              C3'
                  GUA
                          80
                                   5.373
                                          -0.132
                                                  13.290
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C2'
                                                   14.307
ATOM
         854
                  GUA
                          80
                                   4.278
                                          -0.437
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         855
              03'
                  GUA
                          80
                                   4.901
                                           0.824
                                                   12.365
                                                           1.00
                                                                 0.00
              05' CYT
                                 -10.800
                                          -1.763
                                                   14.957
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         856
                          81
ATOM
         857
              C5' CYT
                          81
                                 -10.346
                                          -0.641
                                                   14.230
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         858
              C4'
                  CYT
                          81
                                  -9.022
                                          -0.957
                                                   13.529
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         859
              04'
                  CYT
                          81
                                  -8.062
                                          -1.447
                                                   14.439
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C1'
                  CYT
                                          -2.036
                                                   13.662
ATOM
         860
                          81
                                  -7.042
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                          -2.908
ATOM
         861
              N1
                  CYT
                          81
                                  -6.168
                                                   14.481
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         862
              60
                  CYT
                                  -6.715
                                          -3.790
                                                   15.379
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          81
              C5
                  CYT
                                  ~5.946
                                          -4.635
ATOM
         863
                          81
                                                   16.102
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  CYT
                                  -4.526
                                          -4.552
                                                   15.904
                                                           1.00
ATOM
         864
              C4
                          81
                                                                  0.00
              N4
                  CYT
                                  -3.691
                                          -5.331
                                                   16.595
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         865
                          81
                                  -4.004
                                          -3.706
ATOM
         866
              N3
                  CYT
                                                   15.008
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          81
ATOM
              C2
                  CYT
                                  -4.791
                                          -2.884
                                                   14.264
                                                           1.00
                                                                  0.00
         867
                          81
ATOM
         868
              02
                  CYT
                          81
                                  -4.280
                                          -2.158
                                                   13.415
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C3' CYT
                                          -2.058
                                                   12.465
ATOM
         869
                          81
                                  -9.127
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         870
              C2' CYT
                          81
                                  -7.838
                                          -2.861
                                                   12.658
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              03'
                  CYT
                                  -9.237
                                          -1.454
                                                   11.188
                                                           1.00
                                                                  0.00
         871
                          81
ATOM
         872
              P
                  CYT
                          82
                                  -9.361
                                           -2.314
                                                    9.827
                                                           1.00
                                                                  0.00
              OP1 CYT
                                          -1.518
ATOM
         873
                          82
                                 -10.142
                                                    8.855
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         874
              OP2 CYT
                          82
                                  -9.799
                                           -3.682
                                                   10.182
                                                           1.00
                                                                  0.00
         875
              05' CYT
                          82
                                  -7.833
                                          -2.395
                                                    9.312
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
              C5' CYT
                                  -7.159
                                          -1.251
                                                                  0.00
 ATOM
         876
                          82
                                                    8.818
                                                           1.00
              C4' CYT
                          82
                                  -5.738
                                          -1.606
                                                    8.361
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         877
         878
              04'
                  CYT
                          82
                                  -4.985
                                          -2.110
                                                    9.445
                                                            1.00
                                                                  0.00
 ATOM
 ATOM
         879
              C1' CYT
                          82
                                  -4.159
                                           -3.176
                                                    9.024
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         880
              N1 CYT
                          82
                                  -3.977 -4.074 10.194 1.00
                                                                  0.00
```

	557								558
ATOM	881	C6	CYT	82	-5.085	-4.517	10.863	1.00	0.00
ATOM	882	C5	CYT	82	-4.995	-5.280	11.968	1.00	0.00
ATOM	883	C4	CYT	82	-3.673	-5.615	12.420	1.00	0.00
ATOM	884	N4	CYT	82	-3.507	-6.444	13.451	1.00	0.00
ATOM	885	N3	CYT	82	-2.584	-5.156	11.781	1.00	0.00
ATOM	886	C2	CYT	82	-2.699	-4.383	10.660	1.00	0.00
ATOM	887	02	CYT	82	-1.689	-3.988	10.080	1.00	0.00
ATOM	888	C3'	CYT	82	-5.719	-2.689	7.274	1.00	0.00
ATOM	889	C2'	CYT	82	-4.979	-3.855	7.927	1.00	0.00
ATOM	890	03'	CYT	82	-5.064	-2.168	6.126	1.00	0.00
ATOM	891	P	CYT	83	-5.063	-2.936	4.704	1.00	0.00
ATOM	892		CYT	83	-4.921	-1.923	3.635	1.00	0.00
ATOM	893		CYT	83	-6.201	-3.880	4.680	1.00	0.00
ATOM	894	05'	CYT	83	-3.703	-3.795	4.772	1.00	0.00
ATOM	895	C5 <b>'</b>	CYT	83	-2.462	-3.263	4.341	1.00	0.00
ATOM	896	C4'	CYT	83	-1.338	-4.248	4.681	1.00	0.00
ATOM	897	04'	CYT	83	-1.321	-4.464	6.075	1.00	0.00
ATOM	898	C1'	CYT	83	-0.658	-5.676	6.359	1.00	0.00
ATOM	899	N1	CYT	83	-1.353	-6.341	7.489	1.00	0.00
ATOM	900	C6	CYT	83	-2.708	-6.532	7.429	1.00	0.00
ATOM	901	C5	CYT	83	-3.395	-7.103	8.444	1.00	0.00
ATOM	902	C4	CYT	83	-2.628	-7.529	9.578	1.00	0.00
ATOM	903	N4	CYT	83	-3.228	-8.105	10.619	1.00	0.00
ATOM	904	N3	CYT	83	-1.300	-7.360	9.624	1.00	0.00
ATOM	905	C2	CYT	83	-0.628	-6.764	8.599	1.00	0.00
ATOM	906	02	CYT	83	0.590	-6.623	8.663	1.00	0.00
ATOM	907	C3'	CYT	83	-1.559	-5.646	4.097	1.00	0.00
ATOM	908	C2'	CYT	83	-0.790	-6.518	5.088	1.00	0.00
ATOM	909	03'	CYT	83	-1.052	-5.751	2.779	1.00	0.00
ATOM	910	P	THY	84	-1.282	-7.073	1.870	1.00	0.00
ATOM	911	0P1		84	-2.634	-7.604	2.150	1.00	0.00
ATOM	912		THY	84	-0.896	-6.741	0.481	1.00	0.00
ATOM	913	05'	THY	84	-0.215	-8.140	2.440	1.00	0.00
ATOM	914	C5'	THY	84	1.178	-7.957	2.272	1.00	0.00
ATOM	915	C4'	THY	84	1.937	-9.075	2.994	1.00	0.00
ATOM	916	04'	THY	84	1.469	-9.154	4.331	1.00	0.00
ATOM	917	C1'	THY	84		-10.496	4.697	1.00	0.00
ATOM	918	N1	THY	84	0.163	-10.543	5.737	1.00	0.00
ATOM	919	C6	THY	84	-1.109	-10.103	5.439	1.00	0.00
ATOM	920	C5	THY	84	-2.098	-10.120	6.363	1.00	0.00
ATOM	921	<b>C7</b>	THY	84	-3.466	-9.662	5.889	1.00	0.00
ATOM	922	C4	THY	84	-1.862	-10.573	7.716	1.00	0.00
ATOM	923	04	THY	84	-2.704	-10.620	8.605	1.00	0.00
ATOM	924	N3	THY	84	-0.558	-10.974	7.960	1.00	0.00
ATOM	925	C2	THY	84	0.476	-10.983	7.028	1.00	0.00
ATOM	926	02	THY	84	1.595	-11.366	7.359	1.00	0.00
ATOM	927	C3'	THY	84	1.721	-10.458	2.354	1.00	0.00
ATOM	928	C2'	THY	84	0.810	-11.144	3.376	1.00	0.00
ATOM	929	03'	THY	84	2.976	-11.100	2.175	1.00	0.00
ATOM	930	P	ADE	85	3.127	-12.534	1.437	1.00	0.00

559 0.457 1.00 0.00 ATOM 931 OP1 ADE 85 2.031 - 12.694OP2 ADE 85 4.531 -12.696 0.993 1.00 0.00 932 ATOM 05' ADE 2.864 -13.550 2.652 1.00 ATOM 933 85 C5' ADE 3.754 -13.613 3.746 1.00 ATOM 934 85 C4' ADE 3.115 -14.384 4.901 1.00 ATOM 935 85 936 04' ADE 1.938 -13.767 5.384 1.00 ATOM 85 ATOM 937 C1' ADE 85 1.215 -14.758 6.076 1.00 ATOM 938 N9 ADE 85 -0.171 -14.322 6.333 1.00 939 С8 ADE -1.066 -13.775 5.447 1.00 ATOM 85 N7 ADE -2.225 -13.484 5.966 1.00 ATOM 940 85 ADE -2.089 -13.868 7.294 1.00 ATOM 941 С5 85 60 ADE -2.965 -13.819 8.392 1.00 ATOM 942 85 943 N6 ADE -4.212 -13.360 8.279 1.00 ATOM 85 **ATOM** 944 N1 ADE 85 -2.533 -14.270 9.585 1.00 ATOM 945 C2 ADE 85 -1.297 -14.751 9.678 1.00 ADE ATOM 946 N3-0.381 -14.865 8.721 1.00 85 C4 ADE 7.533 1.00 ATOM 947 85 -0.843 - 14.387ATOM 948 C3' ADE 85 2.690 -15.814 4.532 1.00 C2' ADE 1.253 -15.890 5.059 1.00 ATOM 949 85 950 03' ADE 3.604 -16.685 5.171 1.00 ATOM 85 ATOM 951 P ADE 3.432 -18.278 5.162 1.00 86 OP1 ADE ATOM 952 86 2.442 -18.648 4.130 1.00 OP2 ADE ATOM 953 86 4.776 - 18.9035.133 1.00 05' ADE ATOM 954 86 2.791 -18.562 6.605 C5' ATOM 955 ADE 86 3.508 - 18.2477.782 1.00 2.716 -18.670 ATOM 956 C4' ADE 86 9.019 04' ADE 1.463 -18.004 ATOM 957 86 9.043 C1' ADE 0.413 - 18.9359.201 ATOM 958 86 N9 ADE -0.798 -18.429 ATOM 959 86 8.515 ADE -1.004 -18.225 7.172 1.00 ATOM 960 68 86 ADE -2.157 -17.688 6.876 1.00 ATOM 961 N7 86 ATOM 962 C5ADE -2.758 -17.510 8.117 86 60 ADE -3.990 -16.956 **ATOM** 963 86 8.520 ATOM 964 N6 ADE 86 -4.874 -16.456 7.654 ADE ATOM 965 N1 86 -4.266 -16.884 9.836 ATOM 966 C2ADE 86 -3.369 -17.332 10.706 ATOM N3 ADE -2.183 -17.884 10.456 967 86 ATOM 968 C4 ADE 86 -1.932 -17.9449.122 C3' ADE 2.421 -20.174 9.025 ATOM 969 86 C2' ADE 0.960 -20.220 8.585 ATOM 970 86 03' ADE 2.653 -20.664 10.332 ATOM 971 86 P ATOM 972 CYT 87 2.549 -22.224 10.714 OP1 CYT 3.601 -22.535 11.714 ATOM 973 87 1.00 0.00 OP2 CYT 974 87 2.488 -23.017 9.464 1.00 0.00 ATOM 05' CYT 1.109 -22.269 0.00 ATOM 975 87 11.434 1.00 976 C5' CYT 0.906 - 21.61012.672 0.00 ATOM 87 1.00 ATOM 977 C4' CYT 87 -0.580 -21.377 12.950 1.00 0.00 ATOM 978 04' CYT 87 -1.202 -20.78211.830 1.00 0.00 ATOM 979 C1' CYT 87 -2.586 -21.035 11.916 1.00 0.00 **ATOM** N1 CYT -3.229 -20.89310.584 1.00 0.00 980 87

	501				(202)				ט ב ניתוניו
	561								562
ATOM	981	C6	CYT	87	-2.590 -		9.453	1.00	0.00
ATOM	982	C5	CYT	87	-3.113		8.220	1.00	0.00
ATOM	983	C4	CYT	87	-4.369		8.152	1.00	0.00
ATOM	984	N4	CYT	87	-4.891		6.971	1.00	0.00
ATOM	985	N3	CYT	87	-5.011		9.263	1.00	0.00
ATOM	986	C2	CYT	87	-4.485	-20.298	10.497	1.00	0.00
ATOM	987	02	CYT	87	-5.113	-19.970	11.500	1.00	0.00
ATOM	988	C3'	CYT	87	-1.377	-22.655	13.243	1.00	0.00
ATOM	989	C2'	CYT	87	-2.625	-22.484	12.376	1.00	0.00
ATOM	990	03'	CYT	87	-1.660	-22.710	14.635	1.00	0.00
ATOM	991	P	CYT	88	-2.416	-23.961	15.326	1.00	0.00
ATOM	992	0P1	CYT	88	-2.180	-25.163	14.503	1.00	0.00
ATOM	993	0P2	CYT	88	-2.033	-24.007	16.753	1.00	0.00
ATOM	994	05'	CYT	88	-3.981	-23.598	15.215	1.00	0.00
ATOM	995	C5'	CYT	88	-4.569	-22.571	15.991	1.00	0.00
ATOM	996	C4'	CYT	88	-6.007	-22.318	15.521	1.00	0.00
ATOM	997	04'	CYT	88	-6.008	-21.967	14.153	1.00	0.00
ATOM	998	C1'	CYT	88	-7.237	-22.364	13.585	1.00	0.00
ATOM	999	N1	CYT	88	-7.075		12.123	1.00	0.00
ATOM	1000	C6	CYT	88	-6.001		11.648	1.00	0.00
ATOM	1001	C5	CYT	88	-5.804		10.332	1.00	0.00
ATOM	1002	C4	CYT	88	-6.772		9.447	1.00	0.00
ATOM	1003	N4	CYT	88	-6.655		8.131	1.00	0.00
ATOM	1004	N3	CYT	88	-7.850		9.914	1.00	0.00
ATOM	1005	C2	CYT	88	-8.050		11.254	1.00	0.00
ATOM	1006	02	CYT	88	-9.084		11.668	1.00	0.00
ATOM.	1007	C3'	CYT	88	-6.926		15.635	1.00	0.00
ATOM	1008	C2'	CYT	88	-7.459		14.217	1.00	0.00
ATOM	1009	03'	CYT	. 88		-23.282	16.585	1.00	0.00
ATOM	1010	P	CYT	89		-24.333	16.925	1.00	0.00
ATOM	1010		CYT	89		-25.687	16.538	1.00	0.00
ATOM	1012		CYT	89		-24.082	18.309	1.00	0.00
ATOM	1012	05'	CYT	89	-10.312		15.915	1.00	0.00
ATOM	1013	C5'	CYT	89	-10.985		16.051	1.00	0.00
ATOM	1014	C4'	CYT	89	-10.983		14.954	1.00	0.00
ATOM	1015	04'	CYT	89	-11.434		13.683	1.00	0.00
ATOM	1017	C1'	CYT	89	-12.293		12.762	1.00	0.00
ATOM	1017	N1	CYT	89	-11.456		11.739	1.00	0.00
ATOM	1019	C6	CYT	89	-10.383		12.152	1.00	0.00
ATOM	1020	C5	CYT	89		-25.168			
ATOM	1020	C4	CYT	89			11.282	1.00	$0.00 \\ 0.00$
ATOM	1021	N4	CYT	89		-24.947 -25.422	9.889	1.00	0.00
						-25.432	8.970		
ATOM	1023	N3	CYT	89 80	-10.854		9.479	1.00	0.00
ATOM	1024	C2	CYT	89 en	-11.727		10.380	1.00	0.00
ATOM	1025	02	CYT	89 80	-12.727		9.987	1.00	0.00
ATOM	1026	C3'	CYT	89 90	-13.126		14.986	1.00	0.00
ATOM	1027	C2'	CYT	89	-13.003		13.618	1.00	0.00
ATOM	1028	03'	CYT	89	-14.401		15.201	1.00	0.00
ATOM	1029	P	THY	90		-23.853		1.00	0.00
ATOM	1030	UPl	THY	90	-16.732	-23.110	16.124	1.00	0.00

```
563
                                                                   564
                                -15.419 -25.250 15.624 1.00 0.00
ATOM
       1031 OP2 THY
                         90
                                                          1.00
                                                                 0.00
       1032
             05' THY
                         90
                                 -16.308 -23.831
                                                  13.763
ATOM
             C5'
                 THY
ATOM
       1033
                         90
                                 -16.729 -22.625
                                                  13.152
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 THY
                                                                 0.00
       1034 C4'
                         90
                                 -17.047 -22.851
                                                  11.669
                                                          1.00
ATOM
                 THY
ATOM
       1035
             04'
                         90
                                 -15.918 -23.409
                                                  11.025
                                                          1.00
                                                                 0.00
            C1' THY
       1036
                         90
                                 -16.332 -24.371
                                                  10.080
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                  THY
                                -15.213 -25.324
ATOM
       1037
             N1
                         90
                                                   9.873
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  THY
             C6
                                 -14.675 -25.980
                                                   10.952
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1038
                         90
                  THY
ATOM
       1039
             C5
                         90
                                 -13.560 -26.735
                                                   10.835
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
       1040
             C7
                         90
                                 -13.089 -27.440
                                                   12.093
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  THY
                                -12.868 -26.864
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1041
             C4
                         90
                                                   9.571
ATOM
       1042
             04
                  THY
                                 -11.817 -27.474
                                                   9.403
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         90
ATOM
       1043
             N3
                  THY
                                 -13.494 -26.215
                                                   8.513
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         90
             C2
ATOM
       1044
                  THY
                         90
                                 -14.667 -25.478
                                                    8.599
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                 -15.181 -25.016
                 THY
ATOM
       1045
             02
                         90
                                                   7.584
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C3'
                  THY
                                 -18.212 -23.824
ATOM
       1046
                         90
                                                   11.421
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C2'
                 THY
                                 -17.531 -25.025
                                                   10.765
                                                           1.00
ATOM
        1047
                         90
                                                                 0.00
ATOM
        1048
              03'
                 THY
                         90
                                 -19.151 -23.193
                                                   10.563
                                                          1.00
                                                                 0.00
        1049
                  ADE
                                 -20.591 -23.840
                                                   10.219
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             P
                         91
ATOM
              OP1 ADE
                                 -21.469 -22.760
                                                   9.716
                                                           1.00
                                                                 0.00
        1050
                         91
              OP2 ADE
                                 -21.025 -24.660
                                                   11.372
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1051
                         91
              05' ADE
                                 -20.265 -24.830
                                                    8.993
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1052
                         91
                                                           1.00
ATOM
        1053
              C5' ADE
                          91
                                 -20.073 -24.334
                                                    7.684
                                                                 0.00
ATOM
        1054
              C4'
                  ADE
                                 -19.519 -25.428
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          91
                                                    6.767
ATOM
        1055
              04'
                  ADE
                          91
                                 -18.255 -25.879
                                                    7.202
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1056
              C1' ADE
                          91
                                 -18.008 -27.082
                                                    6.513
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                                                 0.00
ATOM
        1057
              N9
                  ADE
                          91
                                 -16.900 -27.821
                                                    7.145
                                                          1.00
                  ADE
                                                                 0.00
ATOM
        1058
              68
                          91
                                 -16.710 -28.082
                                                    8.475
                                                           1.00
                  ADE
ATOM
        1059
              N7
                                 -15.582 -28.681
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          91
                                                    8.748
                  ADE
ATOM
        1060
              C5
                                 -14.999 - 28.856
                                                    7.496
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          91
              60
                  ADE
                                 -13.778 -29.415
                                                    7.066
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1061
                          91
ATOM
        1062
              N6
                  ADE
                                 -12.851 -29.874
                                                    7.911
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          91
                                                    5.744
ATOM
        1063
              N1
                  ADE
                                 -13.531 -29.484
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          91
ATOM
        1064
              C2
                  ADE
                          91
                                 -14.435 -29.006
                                                    4.892
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  ADE
                                 -15.591 -28.417
ATOM
        1065
              N3
                          91
                                                    5.167
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                                    6.506
ATOM
        1066
              C4
                  ADE
                          91
                                 -15.818 -28.372
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1067
              C3'
                  ADE
                                 -20.377 -26.702
                                                    6.696
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          91
ATOM
        1068
              C2'
                  ADE
                          91
                                 -19.326 -27.822
                                                    6.694
                                                           1.00
                                                                  0.00
              03'
                  ADE
ATOM
        1069
                          91
                                 -21.181 -26.637
                                                    5.527
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  ADE
                                 -22.099 -27.862
ATOM
        1070
              P
                          92
                                                    5.012
                                                           1.00
                                                                  0.00
        1071
              OP1 ADE
                                 -23.174 -27.309
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
                          92
                                                    4.158
              OP2 ADE
 ATOM
        1072
                          92
                                 -22.444 - 28.719
                                                    6.168
                                                           1.00
                                                                  0.00
              05' ADE
                                 -21.080 -28.676
 ATOM
        1073
                          92
                                                    4.067
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C5' ADE
        1074
                          92
                                 -20.496 -28.069
                                                    2.930
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
        1075
                  ADE
                                 -19.456 -29.000
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
              C4'
                          92
                                                    2.302
 ATOM
        1076
              04'
                  ADE
                          92
                                 -18.436 -29.306
                                                    3.239
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
        1077
              C1'
                  ADE
                          92
                                 -18.051 -30.655
                                                    3.075
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
        1078
              N9
                  ADE
                          92
                                 -17.388 -31.147
                                                    4.304
                                                            1.00
                                                                  0.00
              С8
                                 -17.860 -31.108
                                                                  0.00
 ATOM
        1079
                  ADE
                          92
                                                    5.592
                                                           1.00
 ATOM
        1080
              N7
                  ADE
                          92
                                 -17.027 -31.552
                                                    6.490 1.00
                                                                 0.00
```

12.649 -12.096 25.134 1.00 0.00

**ATOM** 

2 CA GLU

1

567 568 ATOM 3 CBGLU 26.051 1.00 0.00 1 13.728 -12.712 GLU 14.408 -13.937 25.418 1.00 0.00 ATOM 4 CG 1 GLU ATOM 13.421 -15.013 24.990 1.00 0.00 5 CD1 OE1 GLU ATOM 13.160 -15.109 23.773 1.00 0.00 6 1 OE2 GLU ATOM 7 1 12.873 -15.683 25.890 1.00 0.00 C 25.427 **ATOM** 8 GLU 11.208 -12.538 1.00 0.00 1 GLU ATOM 9 0 1 10.285 -11.834 25.024 1.00 0.00 N LYS 2 11.009 -13.671 26.109 1.00 0.00 ATOM 10 LYS 2 9.719 -14.244 26.450 1.00 ATOM 11 CA 0.00 CB LYS 2 8.872 -13.283 27.304 1.00 0.00 ATOM 12 CG 2 7.769 -14.044 28.056 ATOM 13 LYS 1.00 0.00 CD LYS 2 0.00 ATOM 6.851 - 13.08128.816 1.00 14 ATOM 15 CE LYS 2 5.724 -13.869 29.496 1.00 0.00 2 **ATOM** NZ LYS 4.778 -12.981 30.199 1.00 0.00 16 ATOM 17 C LYS 2 9.016 -14.735 25.181 1.00 0.00 0 LYS 2 24.970 1.00 ATOM 18 7.835 -14.463 0.00 **ATOM** 19 N HIS 3 9.740 -15.484 24.338 1.00 0.00  $\mathsf{CA}$ HIS 3 9.172 -16.036 23.112 0.00 ATOM 20 1.00 ATOM 21 CBHIS 3 10.288 -16.462 22.149 1.00 0.00 ATOM 22 CG HIS 3 11.037 -17.701 22.566 1.00 0.00 23.376 ATOM 23 ND1 HIS 3 12.159 -17.659 1.00 0.00 CE1 HIS 23.553 ATOM 24 3 12.575 -18.924 1.00 0.00 NE2 HIS ATOM 25 3 11.809 -19.815 22.914 1.00 0.00 ATOM CD2 HIS 10.840 -19.033 22.290 1.00 0.00 26 3 ATOM 27 C HIS 3 8.201 -17.191 23.401 1.00 0.00 **ATOM** 28 0 HIS 3 7.568 -17.707 22.481 1.00 0.00 ATOM 29 N ARG 4 8.076 -17.606 24.671 1.00 0.00 ATOM 30 CA ARG 4 7.201 -18.683 25.113 1.00 0.00 CBATOM 31 ARG 4 7.690 -19.229 26.470 1.00 0.00 32 CG ARG 9.206 - 19.45826.581 ATOM 4 1.00 0.00 9.803 -20.295 ATOM 33 CD ARG 25.447 1.00 0.00 ATOM NE ARG 9.280 -21.665 25.419 1.00 0.00 34 4 ATOM 35 CZ ARG 9.677 -22.603 24.541 1.00 0.00 4 ATOM 36 NH1 ARG 9.168 -23.839 24.616 1.00 0.00 4 NH2 ARG 10.579 -22.315 23.592 ATOM 37 4 1.00 0.00 ATOM 38 C 5.752 -18.184 25.197 1.00 ARG 0.00 4 26.256 ATOM 39 0 ARG 4 5.131 -18.243 1.00 0.00 ATOM 40 N ALA 5 5.216 -17.690 24.075 1.00 0.00 ATOM CA ALA 5 3.861 -17.166 23.964 1.00 0.00 41 ATOM 42 CBALA 5 3.894 -15.642 24.122 1.00 0.00 22.625 ATOM 43 C ALA 5 3.268 - 17.5991.00 0.00 ATOM 44 0 ALA 5 2.779 -16.776 21.853 1.00 0.00 22.358 ATOM 45 N ARG 6 3.327 -18.910 1.00 0.00 CA ARG 6 2.832 -19.539 ATOM 46 21.140 1.00 0.00 ATOM 47 CBARG . 6 1.289 - 19.57621.159 1.00 0.00 **ATOM** CG ARG 0.618 -20.520 20.141 0.00 48 6 1.00 ATOM 49 CDARG 1.079 -21.976 20.288 1.00 0.00 6 ATOM 50 NE ARG 6 0.189 - 22.92019.588 1.00 0.00 ATOM 51 CZ ARG 6 0.411 - 24.24319.509 1.00 0.00 NH1 ARG 1.536 -24.777 ATOM 52 6 20.003 1.00 0.00

	500				(200)					703-13.
1 TO11	569	MILO	100	•	0.500	05 000	10.000		570	
ATOM	53	NH2		6	-0.503 -		18.939		0.00	
ATOM	54	C	ARG	6		-18.867	19.896	1.00	0.00	
ATOM	55	0	ARG	6		-18.586	18.939	1.00	0.00	
ATOM	56	N	LYS	7		-18.618	19.902	1.00	0.00	
ATOM	57	CA	LYS	7		-18.011	18.758	1.00	0.00	
ATOM	58	CB	LYS	7	6.834 -	-17.530	19.094	1.00	0.00	
ATOM	59	CG	LYS	7	7.633 -	-17.241	17.806	1.00	0.00	
ATOM	60	CD	LYS	7	8.878 -	-16.364	18.013	1.00	0.00	
ATOM	61	CE	LYS	7	8.606 -	-14.850	18.056	1.00	0.00	
ATOM	62	NZ	LYS	7	7.997 -	-14.354	16.807	1.00	0.00	
ATOM	63	С	LYS	7	5.388	-19.021	17.613	1.00	0.00	
ATOM	64	0	LYS	7	6.100	-20.024	17.644	1.00	0.00	
ATOM	65	N	ARG	8	4.560	-18.736	16.609	1.00	0.00	
ATOM	66	CA	ARG	8	4.399	-19.553	15.419	1.00	0.00	
ATOM	67	CB	ARG	8	3.118	-19.124	14.699	1.00	0.00	
ATOM	68	CG	ARG	8	3.085	-17.640	14.318	1.00	0.00	
ATOM	69	CD	ARG	8	1.844	-17.332	13.479	1.00	0.00	
ATOM	70	NE	ARG	8	0.614	-17.437	14.273	1.00	0.00	
ATOM	71	CZ	ARG	8	-0.615	-17.249	13.772	1.00	0.00	
MOTA	72		ARG	8	-1.690		14.566	1.00	0.00	
ATOM	73		ARG	8	-0.765		12.471	1.00	0.00	
ATOM	74	C	ARG	8		-19.431	14.519	1.00	0.00	
ATOM	75	0	ARG	8		-18.604	14.787	1.00	0.00	
ATOM	76	N	GLN	9		-20.244	13.455	1.00	0.00	
ATOM	77	CA	GLN	9		-20.206	12.534	1.00	0.00	
ATOM	78	СВ	GLN	9		-21.325	12.849	1.00	0.00	
ATOM	79	CG	GLN	9		-21.069	12.123	1.00	0.00	
ATOM	80	CD	GLN	9		-22.310	11.400	1.00	0.00	
ATOM	81		GLN	9		-23.223	12.035	1.00	0.00	
ATOM	82		GLN	9		-22.345		1.00	0.00	
ATOM	83	С	GLN	9		-20.285	11.086	1.00	0.00	
ATOM	84	0	GLN	9		-21.335	10.622	1.00	0.00	
ATOM	85	N	ALA	10		-19.166				
ATOM	86	CA	ALA	10		-19.072	8.965	1.00	0.00	
ATOM	87	СВ	ALA	10		-17.622	8.494	1.00	0.00	
ATOM	88	C	ALA	10		-20.006	8.124	1.00	0.00	
ATOM	89	0	ALA	10		-20.448	8.563	1.00	0.00	
ATOM	90	N	TRP	. 11		-20.317	6.918	1.00	0.00	
ATOM	91	CA	TRP	11		-21.205	6.017	1.00	0.00	
ATOM	92	СВ	TRP	11		-21.720	4.955	1.00	0.00	
ATOM	93	CG	TRP	11		-22.643	5.412	1.00	0.00	
ATOM	94		TRP	11		-22.411	6.379	1.00	0.00	
ATOM	95		TRP	11		-23.501	6.510	1.00	0.00	
ATOM	96		TRP	11		-24.501	5.624	1.00	0.00	
ATOM	97		TRP	11		-25. <u>7</u> 80	5.363	1.00	0.00	
ATOM	98		TRP	11		-26.577		1.00	0.00	
ATOM	99		TRP			-26.083	3.659	1.00	0.00	
ATOM	100		TRP	11		-24.798	3.916	1.00		
ATOM	101		TRP	11		-23.976	4.910	1.00		
ATOM	102	C	TRP	11		-20.468	5.371	1.00		
ATOM	102	v	1 1/1	11	0.710	40.700	0.011	1.00	0.00	

	F71				(201)			570
	571				0.01010.001	5 054		572
ATOM	103	0	TRP		8.313 -19.284			
ATOM	104	N	LEU	12	9.528 -21.186		1.00	0.00
ATOM	105	CA	LEU	12			1.00	0.00
ATOM	106	CB	LEU	12			1.00	0.00
ATOM	107		LEU	12	11.655 -20.180	6.942	1.00	0.00
ATOM	108	CD1	LEU	12	12.825 -20.483	7.884	1.00	0.00
ATOM	109	CD2	LEU	12	11.486 -18.661	6.818	1.00	0.00
ATOM	110	C	LEU	12	11.018 -21.551	3.327	1.00	0.00
ATOM	111	0	LEU	12	10.216 -22.421	3.002	1.00	0.00
ATOM	112	N	TRP	13	12.136 -21.327	2.623	1.00	0.00
ATOM	113	CA	TRP	13	12.476 -22.103	1.426	1.00	0.00
ATOM	114	CB	TRP	13	13.840 -21.754	0.822	1.00	0.00
ATOM	115	CG	TRP	13	14.733 -20.975	1.710	1.00	0.00
ATOM	116	CD1	TRP	13	14.759 -19.639	1.683	1.00	0.00
ATOM	117	NE1	TRP	13	15.663 -19.161	2.608	1.00	0.00
ATOM	118	CE2	TRP	13	16.265 -20.206	3.287	1.00	0.00
ATOM	119	CZ2	TRP	13	17.229 -20.260	4.306	1.00	0.00
ATOM	120	CH2	TRP	13	17.638 -21.511	4.798	1.00	0.00
ATOM	121	CZ3	TRP	13	17.082 -22.689	4.267	1.00	0.00
ATOM	122		TRP	13	16.117 -22.627		1.00	0.00
ATOM	123		TRP	13	15.686 -21.386	2.731	1.00	0.00
ATOM	124	C		13	12.501 -23.585	1.717	1.00	0.00
ATOM	125	0	TRP	13	12.206 -24.363	0.828	1.00	0.00
ATOM	126	N	GLU	14	12.863 -24.000	2.928	1.00	0.00
ATOM	127	CA	GLU	14	12.881 -25.426	3.192	1.00	0.00
ATOM	128	СВ	GLU	14	13.446 -25.716	4.593	1.00	0.00
ATOM	129	CG	GLU	14	13.690 -27.214	4.848	1.00	0.00
ATOM	130	CD	GLU	14	12.421 -27.987	5.208	1.00	0.00
ATOM	131		GLU	14		4.324	1.00	0.00
ATOM	132		GLU	14			1.00	0.00
ATOM	133	С		14	11.481 -25.989		1.00	0.00
ATOM	134		GLU	14	11.278 -26.781		1.00	0.00
ATOM	135	N	GLU	15	10.517 -25.565	3.780	1.00	0.00
ATOM	136	CA	GLU	15	9.162 -26.051	3.662	1.00	0.00
ATOM	137	СВ	GLU	15	8.328 -25.569	4.854	1.00	0.00
ATOM	138	CG	GLU	15	8.997 -25.795	6.217	1.00	0.00
ATOM	139	CD	GLU	15	9.641 -24.533		1.00	0.00
ATOM	140		GLU	15	10.261 -23.798	5.982	1.00	0.00
ATOM	141		GLU	15	9.467 -24.304	8.002	1.00	0.00
ATOM	142	С	GLU	15	8.530 -25.698	2.305	1.00	0.00
ATOM	143	0	GLU	15	7.943 -26.560	1.660	1.00	0.00
ATOM	144	N	ASP	16	8.635 -24.443	1.863	1.00	0.00
ATOM	145	CA	ASP	16	8.056 -23.966	0.610	1.00	0.00
ATOM	146	CB	ASP	16	8.197 -22.443	0.486	1.00	0.00
ATOM	147	CG	ASP	16	7.315 -21.681	1.459	1.00	0.00
ATOM	148		ASP	16	6.170 -22.132	1.671	1.00	0.00
ATOM	149		2 ASP	16	7.764 -20.619	1.939	1.00	0.00
ATOM	150	C	ASP	16	8.665 -24.606	-0.635	1.00	0.00
ATOM	151	0	ASP	16	7.928 -25.040	-1.519	1.00	0.00
ATOM	152	N	LYS	17	9.998 -24.649	-0.737	1.00	0.00

	573				(=++,			574
ATOM	153	CA	LYS	17	10.656 -25.213	-1.907	1.00	0.00
ATOM	154	СВ	LYS	17	12.158 -24.860	-1.915	1.00	0.00
ATOM	155	CG	LYS	17	12.772 -25.078	-3.305	1.00	0.00
ATOM	156	CD	LYS	17	14.306 -25.019	-3.274	1.00	0.00
ATOM	157	CE	LYS	17	14.833 -23.653	-2.817	1.00	0.00
ATOM	158	NZ	LYS	17	16.306 -23.590	-2.871	1.00	0.00
ATOM	159	C	LYS	17	10.328 -26.710	-1.959	1.00	0.00
ATOM		. 0	LYS	17	10.009 -27.243	-3.025	1.00	0.00
ATOM	161	N	ASN	18	10.362 -27.376	-0.794	1.00	0.00
ATOM	162	CA	ASN	18	10.007 -28.782	-0.670		
	163	CB					1.00	0.00
ATOM			ASN	18	10.204 -29.216	0.789	1.00	0.00
ATOM	164	CG	ASN	18	9.869 -30.676	1.056	1.00	0.00
ATOM	165		ASN	18	9.687 -31.457		1.00	0.00
ATOM	166		ASN	18	9.803 -31.042		1.00	0.00
ATOM	167	C	ASN	18	8.562 -28.979	-1.149	1.00	0.00
ATOM	168	0 N	ASN	18	8.290 -29.873	-1.948	1.00	0.00
ATOM	169	N	LEU	19	7.634 -28.135	-0.682	1.00	0.00
ATOM	170	CA	LEU	19	6.225 -28.188	-1.058	1.00	0.00
ATOM	171	CB	LEU	19	5.417 -27.135	-0.287	1.00	0.00
ATOM	172	CG	LEU	19	3.903 -27.189	-0.548	1.00	0.00
ATOM	173		LEU	19	3.297 -28.555	-0.208	1.00	0.00
ATOM	174	CDZ	LEU	19	3.213 -26.112	0.298	1.00	0.00
ATOM ATOM	175 176	0	LEU Leu	19 19	6.063 -28.026 5.274 -28.750	-2.564 -3.166	1.00	0.00
ATOM	177	N	ARG	20	6.805 -27.098	-3.180	1.00	0.00
ATOM	178	CA	ARG	20	6.735 -26.892	-4.620	1.00	0.00
ATOM	179	CB	ARG	20	7.649 -25.735	-5.063	1.00	0.00
ATOM	180	CG	ARG	20	7.049 23.733	-6.198	1.00	0.00
ATOM	181	CD	ARG	20	6.565 -25.718	-7.401	1.00	0.00
ATOM	182	NE	ARG	20	5.996 -24.855	-8.447	1.00	0.00
ATOM	183	CZ	ARG	20	5.053 -25.224	-9.334	1.00	0.00
ATOM	184		ARG	20	4.575 -26.478	-9.355	1.00	0.00
ATOM	185		ARG	20	4.584 -24.327		1.00	0.00
ATOM	186	C	ARG	20	7.089 -28.208	-5.320	1.00	0.00
ATOM	187	0	ARG	20	6.368 -28.648	-6.218	1.00	0.00
ATOM	188	N	SER	21	8.187 -28.847	-4.887	1.00	0.00
ATOM	189	CA	SER	21	8.608 -30.132	-5.432	1.00	0.00
ATOM	190	СВ	SER	21	9.913 -30.597	-4.773	1.00	0.00
ATOM	191	OG	SER	21	10.454 -31.704	-5.469	1.00	0.00
ATOM	192	C	SER	21	7.473 -31.146	-5.252	1.00	0.00
ATOM	193	0	SER	21	7.132 -31.861	-6.190	1.00	0.00
ATOM	194	N	GLY	22	6.876 -31.186	-4.055	1.00	0.00
ATOM	195	CA	GLY	22	5.766 -32.060	-3.712	1.00	0.00
ATOM	196	C	GLY	22	4.608 -31.928	-4.696	1.00	0.00
ATOM	197	0	GLY	22	4.183 -32.919	-5.282	1.00	0.00
ATOM	198	N	VAL	23	4.099 -30.709	-4.881	1.00	0.00
ATOM	199	CA	VAL	23	2.995 -30.434	-5.787	1.00	0.00
ATOM	200	СВ	VAL	23	2.553 -28.966	-5.655	1.00	0.00
ATOM	201		VAL	23	1.511 -28.615	-6.724	1.00	0.00
ATOM	202		VAL	23	1.933 -28.723		1.00	0.00

```
575
                                                                  576
ATOM
        203 C
                 VAL
                         23
                                  3.367 -30.809 -7.223 1.00 0.00
        204
            0
                 VAL
                         23
                                  2.560 -31.413 -7.926
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
ATOM
        205 N
                 ARG
                         24
                                  4.577 -30.461
                                                -7.673 1.00
                                                                0.00
ATOM
        206
            CA
                 ARG
                         24
                                  5.017 -30.773 -9.027
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        207 CB
                 ARG
                         24
                                  6.368 -30.096 -9.298
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        208
             CG
                 ARG
                         24
                                  6.754 -30.206 -10.780
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        209
             CD
                 ARG
                         24
                                  8.058 -29.458 -11.073
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        210 NE
                 ARG
                         24
                                  8.390 -29.532 -12.504
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        211 CZ
                 ARG
                         24
                                  9.473 -28.981 -13.077
                                                          1.00
                                                                0.00
        212 NH1 ARG
ATOM
                         24
                                 10.365 -28.311 -12.337
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        213 NH2 ARG
                         24
                                  9.659 -29.102 -14.398
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        214
             C
                  ARG
                         24
                                  5.087 -32.287 -9.268
                                                          1.00
                                                                0.00
        215 0
                  ARG
                                  4.680 -32.765 -10.326
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
                         24
ATOM
        216
             N
                  LYS
                         25
                                  5.618 -33.034 -8.299
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        217 CA
                 LYS
                         25
                                  5.803 -34.476 -8.370
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        218
             CB
                  LYS
                         25
                                  6.788 -34.905
                                                 -7.268
                                                          1.00
                                                                0.00
             CG
                 LYS
                                  8.233 -34.442 -7.507
ATOM
        219
                         25
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        220
             CD
                 LYS
                         25
                                  8.961 -35.349
                                                 -8.506
                                                          1.00
                                                                0.00
             CE
                 LYS
                                 10.431 -34.928
ATOM
        221
                         25
                                                  -8.622
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        222 NZ
                 LYS
                                 11.178 -35.802
                         25
                                                 -9.547
                                                          1.00
                                                                0.00
        223 C
                  LYS
                                                  -8.201
ATOM
                         25
                                  4.518 -35.287
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        224
             0
                  LYS
                         25
                                  4.332 -36.279
                                                 -8.903
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        225
             N
                  TYR
                         26
                                  3.668 -34.913 -7.236
                                                          1.00
                                                                0.00
                  TYR
ATOM
        226
             CA
                         26
                                  2.476 - 35.669
                                                  -6.865
                                                          1.00
                                                                0.00
             CB
                  TYR
ATOM
        227
                         26
                                  2.629 -36.036
                                                  -5.383
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        228
             CG
                 TYR
                         26
                                  3.965 -36.701
                                                  -5.098
                                                          1.00
                                                                0.00
        229
             CD1 TYR
                                                  -5.718
ATOM
                         26
                                  4.284 - 37.925
                                                          1.00
                                                                0.00
             CE1 TYR
ATOM
        230
                         26
                                  5.524 -38.540
                                                  -5.478
                                                          1.00
                                                                0.00
        231
             CZ TYR
                                  6.452 -37.933 -4.616
ATOM
                         26
                                                          1.00
                                                                0.00
        232
             OH
                 TYR
ATOM
                         26
                                  7.658 -38.524 -4.380
                                                                0.00
                                                          1.00
        233
             CE2 TYR
                         26
                                  6.137 -36.714 -3.996
                                                                0.00
ATOM
                                                          1.00
ATOM
        234
             CD2 TYR
                                  4.898 -36.097
                                                  -4.235
                                                          1.00
                                                                0.00
                         26
ATOM
        235
             C
                  TYR
                                  1.124 -35.028
                                                 -7.183
                                                                0.00
                         26
                                                          1.00
ATOM
        236
             0
                  TYR
                         26
                                  0.106 - 35.708
                                                 -7.036
                                                          1.00
                                                                0.00
             N
                  GLY
ATOM
        237
                         27
                                  1.097 -33.767 -7.628
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        238
             CA
                  GLY
                         27
                                  -0.122 -33.060
                                                  -8.001
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        239
             C
                  GLY
                                  -0.738 -32.275
                                                  -6.844
                         27
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        240
             0
                  GLY
                         27
                                  -0.697 -32.710
                                                  -5.693
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  GLU
ATOM
        241
             N
                         28
                                 -1.326 -31.115
                                                 -7.162
                                                          1.00
                                                                0.00
             CA
                  GLU
                                 -1.982 -30.240
ATOM
        242
                         28
                                                  -6.198
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  GLU
ATOM
        243
             CB
                                 -2.340 -28.907
                                                  -6.883
                         28
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CG
                  GLU
ATOM
        244
                         28
                                 -2.704 - 27.811
                                                  -5.873
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CD
                  GLU
ATOM
        245
                         28
                                 -3.057 - 26.488
                                                  -6.550
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OE1 GLU
                                 -2.178 -25.926
                                                  -7.242
ATOM
        246
                         28
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OE2 GLU
ATOM
        247
                         28
                                 -4.196 -26.013
                                                  -6.354
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C
                  GLU
ATOM
        248
                         28
                                 -3.225 -30.941
                                                  -5.639
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        249
              0
                  GLU
                                  -3.881 -31.697
                                                  -6.353
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         28
        250
ATOM
              N
                  GLY
                         29
                                 -3.543 -30.690
                                                  -4.365
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CA
                  GLY
ATOM
         251
                         29
                                  -4.697 -31.275
                                                  -3.697
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             C
                  GLY
         252
                                  -4.459 -32.729
                                                 -3.293
                         29
                                                         1.00
                                                                0.00
```

	577								578
ATOM	253	0	GLY	29	-5.351	-33.564	-3.421	1.00	0.00
ATOM	254	N	ASN	30	-3.252	-33.027	-2.795	1.00	0.00
ATOM	255	CA	ASN	30	-2.840	-34.350	-2.337	1.00	0.00
ATOM	256	CB	ASN	30	-2.224	-35.174	-3.482	1.00	0.00
ATOM	257	CG	ASN	30		-35.363	-4.691	1.00	0.00
ATOM	258	OD1		30		-36.339	-4.772	1.00	0.00
ATOM	259	ND2		30		-34.456	-5.661	1.00	0.00
ATOM	260	С	ASN	30		-34.118	-1.223	1.00	0.00
ATOM	261	0	ASN	. 30		-34.583	-1.292	1.00	0.00
ATOM	262	N	TRP	31		-33.356	-0.204	1.00	0.00
ATOM	263	CA	TRP	31		-32.976	0.900	1.00	0.00
ATOM	264	СВ	TRP	31		-31.839	1.714	1.00	0.00
ATOM	265	CG	TRP	31		-30.916	0.858	1.00	0.00
ATOM	266	CD1	TRP	31		-30.859	0.811	1.00	0.00
ATOM	267		TRP	31		-29.915	-0.115	1.00	0.00
ATOM	268		TRP	31		-29.316	-0.711	1.00	0.00
ATOM	269		TRP	31		-28.324	-1.693	1.00	0.00
ATOM	270		TRP	31		-27.928	-2.098	1.00	0.00
ATOM	271		TRP	31		-28.520	-1.527	1.00	0.00
ATOM	272		TRP	31		-29.515	-0.543	1.00	0.00
ATOM	273		TRP	31		-29.937	-0.109	1.00	0.00
ATOM	274	C	TRP	31		-34.176	1.728	1.00	0.00
ATOM	275	0	TRP	31		-34.172	2.237	1.00	0.00
ATOM	276	N	SER	32		-35.210	1.848	1.00	0.00
ATOM	277	CA	SER	32		-36.421	2.584	1.00	0.00
ATOM	278	CB	SER	32		-37.301	2.749	1.00	0.00
ATOM	279	OG	SER	32		-38.484	3.458	1.00	0.00
ATOM	280	C	SER	32		-37.139	1.824	1.00	0.00
ATOM	281	0	SER	32		-37.472	2.389	1.00	0.00
ATOM	282	N	LYS	33		-37.359	0.525	1.00	0.00
ATOM	283	CA	LYS	33		-37.997	-0.394	1.00	0.00
ATOM	284	CB	LYS	33		-37.899	-1.791	1.00	0.00
ATOM	285	CG	LYS	33		-38.682	-2.927	1.00	0.00
ATOM	286	CD	LYS	33		-38.358	-4.209	1.00	0.00
ATOM	287	CE	LYS	33		-39.047	-5.455	1.00	0.00
ATOM	288	NZ	LYS	33		-38.482	-6.684	1.00	0.00
ATOM	289	C	LYS	33		-37.279	-0.293	1.00	0.00
ATOM	290	0	LYS	33		-37.900	0.002	1.00	0.00
ATOM	291	N	ILE	34		-35.960	-0.516	1.00	0.00
ATOM	292	CA	ILE	34		-35.107	-0.449	1.00	0.00
ATOM	293	CB	ILE	34		-33.653	-0.784	1.00	0.00
ATOM	294		ILE	34		-32.691	-0.456	1.00	0.00
ATOM	295		ILE	34		-33.541	-2.276	1.00	0.00
ATOM	296	CD1	ILE	34		-32.244	-2.614	1.00	0.00
ATOM	297	C	ILE	34		-35.239	0.915	1.00	0.00
ATOM	298	0	ILE	34		-35.449	0.959	1.00	0.00
ATOM	299	N	LEU	35		-35.124	2.016	1.00	0.00
ATOM	300	CA	LEU	35		-35.225	3.379	1.00	0.00
ATOM	301	CB	LEU	35		-34.943	4.376	1.00	0.00
ATOM	302	CG	LEU	35		-35.010	5.861	1.00	0.00
014	556				2.000	JJ.JIJ	3.501	00	0.00

579 580 ATOM 303 CD1 LEU 3.779 -34.029 6.209 1.00 0.00 35 CD2 LEU 35 1.422 -34.678 6.713 1.00 0.00 ATOM 304 4.065 -36.579 1.00 ATOM 305 C LEU 35 3.635 0.00 0 LEU 35 5.058 -36.650 4.357 1.00 0.00 ATOM 306 307 N LEU 3.540 -37.661 1.00 ATOM 36 3.049 0.00 308 CA LEU 4.111 -38.989 **ATOM** 36 3.220 1.00 0.00 CBLEU 3.118 -40.065 1.00 ATOM 309 36 2.758 0.00 ATOM CGLEU 1.919 -40.216 3.712 1.00 310 36 0.00 CD1 LEU 0.773 - 40.9322.990 1.00 ATOM 311 36 0.00 CD2 LEU 2.295 -41.008 ATOM 312 36 4.971 1.00 0.00 ATOM 313 C LEU 5.441 -39.088 1.00 0.00 36 2.474 0.00 ATOM 314 0 LEU 6.437 -39.534 1.00 36 3.046 ATOM 315 N HIS 5.465 -38.674 1.202 1.00 0.00 37 CA HIS ATOM 316 37 6.673 - 38.7130.387 1.00 0.00 CBHIS 6.349 -38.313 ATOM 317 37 -1.0561.00 0.00 ATOM CG HIS 37 5.384 -39.236 -1.753318 1.00 0.00 ATOM 319 ND1 HIS 37 5.609 -40.597 -1.8971.00 0.00 ATOM 320 CE1 HIS 37 4.557 -41.104 -2.5641.00 0.00 ATOM 321 NE2 HIS 37 3.645 -40.183 -2.877 1.00 0.00 **ATOM** 322 CD2 HIS 4.175 -39.005 -2.3611.00 0.00 37 ATOM 323 C. HIS 37 7.748 -37.792 0.966 1.00 0.00 HIS ATOM 324 0 37 8.844 -38.242 1.294 1.00 0.00 0.00 ATOM 325 N TYR 38 7.424 - 36.5051.093 1.00 ATOM 326 CA TYR 38 8.288 -35.461 1.613 1.00 0.00 TYR ATOM 327 CB 38 8.184 -34.219 0.722 1.00 0.00 ATOM 328 CG TYR 38 8.846 -34.280 -0.6411.00 0.00 CD1 TYR ATOM 329 38 8.067 -34.184 -1.8081.00 0.00 CE1 TYR 8.682 -34.216 ATOM 330 38 -3.0721.00 0.00 CZ TYR ATOM 331 38 10.076 -34.343 -3.1721.00 0.00 ATOM 332 OH TYR 38 10.660 -34.366 -4.405 1.00 0.00 CE2 TYR ATOM 333 38 10.858 -34.442 -2.0081.00 0.00 ATOM 334 CD2 TYR 38 10.244 -34.410 -0.7441.00 0.00 ATOM 335 C TYR 38 7.813 -35.058 3.005 1.00 0.00 ATOM 336 0 TYR 38 6.672 -34.636 3.161 1.00 0.00 N LYS ATOM 337 39 8.684 -35.157 4.010 1.00 0.00 ATOM 338 CA LYS 39 8.349 -34.732 5.363 1.00 0.00 **ATOM** 339 CBLYS 39 9.108 -35.577 6.397 1.00 0.00 ATOM 340 CG LYS 39 8.355 -36.871 6.757 1.00 0.00 LYS ATOM 341 CD39 8.063 -37.823 5.584 1.00 0.00 9.329 -38.500 CE LYS 39 ATOM 342 5.047 1.00 0.00 NZ LYS 9.049 - 39.285ATOM 343 39 3.831 1.00 0.00 ATOM 344 C LYS 39 8.676 -33.237 5.451 1.00 0.00 0 LYS 9.529 -32.752 ATOM 345 39 4.706 1.00 0.00 N PHE 7.990 -32.512 ATOM 346 40 1.00 0.00 6.341 CA PHE 8.165 -31.076 ATOM 347 40 6.527 1.00 0.00 PHE ATOM 348 CB 40 6.927 -30.314 6.034 1.00 0.00 ATOM 349 CG PHE 40 6.633 -30.476 4.559 1.00 0.00 ATOM 350 CD1 PHE 40 6.010 -31.636 4.066 1.00 0.00 CE1 PHE ATOM 351 40 5.752 -31.769 2.692 1.00 0.00 CZ PHE ATOM 352 6.113 - 30.7421.805 1.00 0.00 40

	581								582
ATOM	353	CE2	PHE	40	6.731	-29.587	2.302	1.00	0.00
ATOM	354	CD2	PHE	40	6.992	-29.450	3.670	1.00	0.00
ATOM	355	С	PHE	40	8.393	-30.739	7.992	1.00	0.00
ATOM	356	0	PHE	40	8.170	-31.562	8.881	1.00	0.00
ATOM	357	N	ASN	41	8.821	-29.497	8.221	1.00	0.00
ATOM	358	CA	ASN	41	9.087	-28.932	9.529	1.00	0.00
ATOM	359	CB	ASN	41		-27.642	9.324	1.00	0.00
ATOM	360	CG	ASN	41		-26.833	10.599	1.00	0.00
ATOM	361		ASN	41		-27.377	11.702	1.00	0.00
ATOM	362		ASN	41		-25.517	10.436	1.00	0.00
ATOM	363	С	ASN	41		-28.699	10.284	1.00	0.00
ATOM	364	0	ASN	41		-27.575	10.376	1.00	0.00
ATOM	365	N	ASN	42		-29.783	10.842	1.00	0.00
ATOM	366	CA	ASN	42		-29.796	11.649	1.00	0.00
ATOM	367	CB	ASN	42		-29.097	12.995	1.00	0.00
ATOM	368	CG	ASN	42		-29.705	13.742	1.00	0.00
ATOM	369		ASN	42		-30.640	14.518	1.00	0.00
ATOM	370		ASN	42		-29.183	13.524	1.00	0.00
ATOM	371	C	ASN	42		-29.190	10.927	1.00	0.00
ATOM	372	0	ASN	42		-28.281	11.457	1.00	0.00
ATOM	373	N	ARG	43		-29.694	9.728	1.00	0.00
ATOM	374	CA	ARG	43		-29.222	8.930	1.00	0.00
ATOM	375	СВ	ARG	43		-28.637	7.601	1.00	0.00
ATOM	376	CG	ARG	43		-27.649	7.706	1.00	0.00
ATOM	377	CD	ARG	43		-26.374	8.485	1.00	0.00
ATOM	378	NE	ARG	43		-25.404	8.325	1.00	0.00
ATOM	379	CZ	ARG	43		-24.213	8.946	1.00	0.00
ATOM	380		ARG	43		-23.495	8.860	1.00	0.00
ATOM	381		ARG	43		-23.717	9.665	1.00	0.00
ATOM	382	С	ARG	43		-30.376	8.674	1.00	0.00
ATOM	383	0	ARG	43		-31.468	8.295	1.00	0.00
ATOM	384	N	THR	44		-30.126	8.879	1.00	0.00
ATOM	385	CA	THR	44		-31.073	8.694	1.00	0.00
ATOM	386	CB	THR	44		-30.795	9.782	1.00	0.00
ATOM	387	CG2	THR	44	-0.474	-30.882	11.194	1.00	0.00
ATOM	388	0G1	THR	44	-1.614	-29.505	9.571	1.00	0.00
ATOM	389	C	THR	44	-0.677	-30.865	7.327	1.00	0.00
ATOM	390	0	THR	44	-0.296	-29.962	6.586	.1.00	0.00
ATOM	391	N	SER	45	-1.703	-31.671	7.016	1.00	0.00
ATOM	392	CA	SER	45	-2.484	-31.536	5.789	1.00	0.00
ATOM	393	CB	SER	45	-3.632	-32.559	5.794	1.00	0.00
ATOM	394	OG	SER	45	-4.543	-32.302	4.745	1.00	0.00
ATOM	395	C	SER	45	-3.026	-30.104	5.718	1.00	0.00
ATOM	396	0	SER	45	-2.912	-29.441	4.686	1.00	0.00
ATOM	397	N	VAL	46	-3.595	-29.629	6.836	1.00	0.00
ATOM	398	CA	VAL	46	-4.140	-28.286	6.973	1.00	0.00
ATOM	399	CB	VAL	46	-4.718	-28.075	8.387	1.00	0.00
ATOM	400	CG1	VAL	46	-5.209	-26.633	8.585	1.00	0.00
ATOM	401	CG2	VAL	46	-5.896	-29.019	8.653	1.00	0.00
ATOM	402	C	VAL	46	-3.059	-27.252	6.658	1.00	0.00

583 584 ATOM 403 0 VAL -3.311 -26.337 5.879 1.00 0.00 46 N MET 47 -1.870 -27.3897.259 1.00 0.00 ATOM 404 MET -0.781 -26.445 7.029 1.00 0.00 ATOM 405 CA 47 CB MET 47 0.405 - 26.7527.949 1.00 0.00 ATOM 406 MET ATOM 407 CG 47 0.085 - 26.5609.433 1.00 0.00 ATOM 408 SD MET 47 -0.228 -24.8439.907 1.00 0.00 ATOM 409 CE MET 47 -0.295 -25.067 11.697 1.00 0.00 ATOM 410 C MET 47 -0.341 -26.423 5.562 1.00 0.00 0 MET -0.239 -25.347 4.979 1.00 ATOM 411 47 0.00 N LEU -0.080 -27.592 1.00 0.00 ATOM 412 48 4.962 CA LEŲ 0.341 -27.712 3.566 1.00 0.00 ATOM 413 48 ATOM CBLEU 0.472 - 29.1911.00 0.00 414 48 3.161 ATOM 415 CG LEU 48 1.879 -29.779 3.339 1.00 0.00 CD1 LEU 2.235 -30.031 4.804 1.00 0.00 ATOM 416 48 0.00 CD2 LEU 1.993 -31.106 2.591 1.00 ATOM 417 48 C LEU -0.675 -27.017 2.659 1.00 0.00 ATOM 418 48 0 LEU -0.324 -26.129 1.880 1.00 0.00 ATOM 419 48 ATOM 420 N LYS 49 -1.936 -27.4382.781 1.00 0.00 CALYS -3.046 -26.902 2.019 1.00 0.00 ATOM 421 49 ATOM 422 CB LYS 49 -4.343 - 27.5352.537 1.00 0.00 **ATOM** 423 CG LYS 49 -5.593 -26.957 1.855 1.00 0.00 LYS ATOM 424 CD 49 -6.775 - 26.8752.822 1.00 0.00 CE LYS -6.598 -25.880 0.00 ATOM 425 49 3.979 1.00 ATOM NZ LYS -7.868 -25.681 4.698 1.00 0.00 426 49 C LYS ATOM 427 49 -3.113 -25.384 2.163 1.00 0.00 ATOM 0 LYS -3.075 -24.670 1.00 428 49 1.165 0.00N ASP ATOM 429 50 -3.245 -24.899 3.402 1.00 0.00 ATOM 430 CA ASP 50 -3.375 -23.481 3.672 1.00 0.00 ATOM 431 CB ASP 50 -3.573 -23.213 5.161 1.00 0.00 ATOM 432 CG ASP 50 -3.923 -21.746 5.355 1.00 0.00 **ATOM** 433 OD1 ASP 50 -3.144 -21.041 6.026 1.00 0.00 ATOM 434 OD2 ASP 50 -4.986 -21.348 4.833 1.00 0.00 C ASP -2.202 -22.678 0.00 ATOM 435 50 3.122 1.00 ATOM 436 0 ASP 50 -2.413 -21.615 2.544 1.00 0.00 ATOM 437 N ARG -0.973 -23.177 3.282 1.00 0.00 51 **ATOM** 438 CA ARG 51 0.197 - 22.4852.774 1.00 0.00 ATOM 439 CBARG 51 1.492 -23.225 3.134 1.00 0.00 CG ARG 2.724 -22.545 0.00 ATOM 440 51 2.511 1.00 ATOM CD ARG 2.875 -21.092 1.00 0.00 441 51 2.978 ATOM 442 NE ARG 51 4.153 -20.518 2.544 1.00 0.00 ATOM CZARG 4.466 -19.212 2.536 1.00 0.00 443 51 **ATOM** NH1 ARG 3.548 -18.286 444 51 2.834 1.00 0.00 ATOM 445 NH2 ARG 51 5.711 -18.827 2.236 1.00 0.00 ATOM 446 C ARG 51 0.079 - 22.3111.265 1.00 0.00 ATOM 447 0 ARG 51 0.235 -21.196 0.769 1.00 0.00 ATOM TRP -0.194 -23.396 0.530 0.00 448 N 52 1.00 ATOM 449 CATRP 52 -0.314 -23.317 -0.9111.00 0.00 CB-0.445 - 24.719ATOM 450 TRP 52 -1.489 1.00 0.00 CG TRP 52 -0.201 -24.825 -2.961ATOM 451 1.00 0.00 ATOM 452 CD1 TRP 52 -1.167 -24.928 -3.894 1.00 0.00

					(204)			1011#12 O t
	585							586
ATOM	453	NE1		52	-0.603 -25.033	-5.147	1.00	0.00
ATOM	454	CE2		52	0.774 -24.996	-5.080	1.00	0.00
ATOM	455		TRP	52	1.779 -25.071	-6.055	1.00	0.00
ATOM	456		TRP	52	3.122 -25.002	-5.658	1.00	0.00
ATOM	457	CZ3	TRP	52	3.443 -24.852	-4.298	1.00	0.00
ATOM	458	CE3	TRP	52	2.427 -24.778	-3.327	1.00	0.00
ATOM	459	CD2	TRP	52	1.063 -24.853	-3.690	1.00	0.00
ATOM	460	C	TRP	52	-1.482 -22.416	-1.306	1.00	0.00
ATOM	461	0	TRP	52	-1.364 -21.660	-2.262	1.00	0.00
ATOM	462	N	ARG	53	-2.598 -22.477	-0.568	1.00	0.00
ATOM	463	CA	ARG	53	-3.778 -21.655	-0.807	1.00	0.00
ATOM	464	CB	ARG	53	-4.884 -22.056	0.187	1.00	0.00
ATOM	465	CG	ARG	53	-6.169 -21.218	0.091	1.00	0.00
ATOM	466	CD	ARG	53	-6.233 -20.107	1.152	1.00	0.00
ATOM	467	NE	ARG	53	-6.430 -20.635	2.516	1.00	0.00
ATOM	468	CZ	ARG	53	-7.603 -20.733	3.166	1.00	0.00
ATOM	469		ARG	53	-7.605 -21.033	4.467	1.00	0.00
ATOM	470		ARG	53	-8:771 -20.521	2.544	1.00	0.00
ATOM	471	С	ARG	53	-3.383 -20.178	-0.725	1.00	0.00
ATOM	472	0	ARG	53	-3.654 -19.417	-1.651	1.00	0.00
ATOM	473	N	THR	54	-2.728 -19.782	0.371	1.00	0.00
ATOM	474	CA	THR	54	-2.250 -18.429	0.617	1.00	0.00
ATOM	475	СВ	THR	54	-1.546 -18.401	1.986	1.00	0.00
ATOM	476		THR	54	-0.791 -17.100	2.257	1.00	0.00
ATOM	477		THR	54	-2.497 -18.579	3.013	1.00	0.00
ATOM	478	C	THR	54	-1.301 -17.997	-0.502	1.00	0.00
ATOM	479	0	THR	54	-1.564 -17.023	-1.204	1.00	0.00
ATOM	480	N	MET	55	-0.192 -18.725	-0.651	1.00	0.00
ATOM	481	CA	MET	55	0.857 -18.508	-1.620	1.00	0.00
ATOM	482	CB	MET	55	1.761 -19.744	-1.518	1.00	0.00
ATOM	483	CG	MET	55	2.879 -19.736	-2.543	1.00	0.00
ATOM	484	SD	MET	55	4.063 -18.391	-2.377	1.00	0.00
ATOM	485	CE	MET	55	4.681 -18.554	-4.053	1.00	0.00
ATOM	486	C	MET	55	0.286 -18.298	-3.025	1.00	0.00
ATOM	487	0	MET	55	0.585 -17.301	-3.679	1.00	0.00
ATOM	488	N	LYS	56	-0.534 -19.247	-3.482	1.00	0.00
ATOM	489	CA	LYS	56	-1.168 -19.237	-4.787	1.00	0.00
ATOM	490	CB	LYS	56	-1.885 -20.580	-4.978	1.00	0.00
ATOM	491	CG	LYS	56	-2.492 -20.781	-6.367	1.00	0.00
ATOM	492	CD	LYS	56	-2.879 -22.260	-6.503	1.00	0.00
ATOM	493	CE	LYS	56	-3.650 -22.508	-7.800	1.00	0.00
ATOM	494	NZ	LYS	56	-3.893 -23.948	-8.021	1.00	0.00
ATOM	495	C	LYS	56	-2.090 -18.028	-4.925	1.00	0.00
ATOM	496	0	LYS	56	-1.906 -17.220	-5.829	1.00	0.00
ATOM	497	N	LYS	57	-3.075 -17.892	-4.034	1.00	0.00
ATOM	498	CA	LYS	57	-4.026 -16.788	-4.047	1.00	0.00
ATOM	499	CB	LYS	57	-4.934 -16.896	-2.812	1.00	
ATOM	500	CG	LYS	57	-6.028 -15.819	-2.782	1.00	
ATOM	501	CD	LYS	57	-6.913 -16.014	-1.543	1.00	
ATOM	502	CE	LYS	57	-8.067 -15.005	-1.488	1.00	
VION	JUZ	CE	LIS	JI	0.001 -10.000	1.400	1.00	0.00

587 588 ATOM 503 NZ LYS -7.594 -13.614 -1.357 1.00 0.00 57 ATOM 504 C LYS 57 -3.346 -15.414 -4.1081.00 0.00 ATOM 505 0 LYS 57 -3.779 -14.555-4.874 1.00 0.00 ATOM 506 N LEU 58 -2.312 -15.193 -3.2891.00 0.00 ATOM 507 CA LEU 58 -1.619 -13.915 -3.2031.00 0.00 ATOM 508 CBLEU 58 -0.977 -13.757 -1.8141.00 0.00 **ATOM** 509 CG LEU -1.973 -13.767 -0.6401.00 0.00 58 ATOM 510 CD1 LEU 58 -1.187 -13.653 0.672 1.00 0.00 ATOM CD2 LEU -2.985 -12.616 -0.7161.00 0.00 511 58 ATOM 512 С LEU 58 -0.567 -13.689 -4.294 1.00 0.00 ATOM 513 0 LEU 58 -0.640 -12.690 -5.0061.00 0.00 **ATOM** N LYS 0.432 - 14.573-4.4041.00 0.00 514 59 ATOM 515 CA LYS 59 1.536 -14.406 -5.3441.00 0.00 ATOM 516 CBLYS 59 2.832 -14.950 -4.7301.00 0.00 ATOM 517 CG LYS 59 3.162 -14.230 -3.4141.00 0.00 ATOM 518 CD LYS 59 4.608 -14.525 -3.0011.00 0.00 CE LYS -1.716ATOM 519 59 5.015 -13.794 1.00 0.00 ATOM NZ LYS 4.249 -14.243 -0.540520 59 1.00 0.00521 С LYS 59 1.294 -14.983 -6.7401.00 0.00 ATOM ATOM 522 0 LYS 59 2.016 -14.613 -7.6621.00 0.00 N LEU 0.307 - 15.869-6.910ATOM 523 60 1.00 0.00 ATOM 524 CA LEU 60 -0.030 -16.479 -8.193 1.00 0.00 525 CB LEU 60 -0.620 -15.443 -9.169ATOM 1.00 0.00 ATOM 526 CG LEU 60 -1.912 -14.782 -8.6581.00 0.00 **ATOM** CD1 LEU 527 -2.209 -13.535 -9.4981.00 0.00 60 ATOM 528 CD2 LEU 60 -3.112 -15.735 -8.7481.00 0.00 C LEU ATOM 529 60 1.155 -17.240 -8.7881.00 0.00 ATOM 530 0 LEU 60 1.811 -16.770 -9.7151.00 0.00 ATOM 531 N ILE 61 1.400 -18.440 -8.249 1.00 0.00 ATOM 532 CA ILE 61 2.461 -19.346 -8.682 1.00 0.00 CB ILE ATOM 533 2.338 -20.687 -7.931 1.00 0.00 61 CG2 ILE 3.384 -21.697 ATOM 534 61 -8.4341.00 0.00 ATOM 535 CG1 ILE 2.491 -20.474 -6.4141.00 0.00 61 **ATOM** 536 CD1 ILE 61 2.217 -21.759 -5.634 1.00 0.00 C ILE ATOM 537 61 2.369 -19.555 -10.198 1.00 0.00 538 0 ILE 3.375 -19.481 -10.902 0.00 ATOM 61 1.00 N ATOM 539 SER 62 1.153 -19.818 -10.686 1.00 0.00 ATOM CA SER 540 62 0.851,-20.034 -12.088 1.00 0.00 ATOM CBSER 62 1.349 -21.413 -12.539 541 1.00 0.00 0G SER ATOM 542 62 0.853 -22.432 -11.693 -1.00 0.00 ATOM 543 C SER 62 -0.658 -19.887 -12.279 1.00 0.00 ATOM 0 SER 62 -1.423 -19.985 -11.318 544 1.00 0.00 ATOM 545 N SER 63 -1.083 -19.645 -13.523 1.00 0.00 **ATOM** 546 CA SER 63 -2.485 -19.484 -13.887 1.00 0.00 ATOM 547 CBSER 63 -2.936 -18.035 -13.647 1.00 0.00 **ATOM** 548 0G SER -2.685 -17.645 -12.310 63 1.00 0.00 SER ATOM 549 C 63 -2.658 -19.910 -15.344 1.00 0.00 SER ATOM 550 0 -3.183 -19.159 -16.163 63 1.00 0.00ATOM 551 N ASP 64 -2.199 -21.128 -15.655 1.00 0.00

ATOM

552

CA ASP

64

-2.264 -21.711 -16.988 1.00 0.00

					(296) 特開200
	589				590
ATOM	553	CB	ASP	64	-1.197 -22.811 -17.095 1.00 0.00
ATOM	554	CG	ASP	64	-1.129 -23.441 -18.484 1.00 0.00
ATOM	555	0D1	ASP	64	-1.481 -22.737 -19.456 1.00 0.00
ATOM	556	0D2	ASP	64	-0.699 -24.612 -18.549 1.00 0.00
ATOM	557	C	ASP	64	-3.684 -22.226 -17.243 1.00 0.00
ATOM	558	0	ASP	64	-3.927 -23.431 -17.294 1.00 0.00
ATOM	559	N	SER	65	-4.627 -21.291 -17.384 1.00 0.00
ATOM	560	CA	SER	65	-6.036 -21.568 -17.607 1.00 0.00
ATOM	561	CB	SER	65	-6.664 -22.114 -16.317 1.00 0.00
ATOM	562	0G	SER	65	-6.376 -21.258 -15.228 1.00 0.00
ATOM	563	С	SER	65	-6.731 -20.273 -18.024 1.00 0.00
ATOM	564	0	SER	65	-6.695 -19.301 -17.271 1.00 0.00
ATOM	565	N	GLU	66	-7.359 -20.267 -19.204 1.00 0.00
ATOM	566	CA	GLU	66	-8.079 -19.112 -19.722 1.00 0.00
ATOM	567	СВ	GLU	66	-8.362 -19.307 -21.221 1.00 0.00
ATOM	568	CG	GLU	66	-9.233 -20.533 -21.533 1.00 0.00
ATOM	569	CD	GLU	66	-9.399 -20.719 -23.037 1.00 0.00
ATOM	570		GLU	66	-10.506 -20.419 -23.535 1.00 0.00
ATOM	571		GLU	66	-8.410 -21.159 -23.664 1.00 0.00
ATOM	572	C	GLU	66	-9.358 -18.859 -18.914 1.00 0.00
ATOM	573	0	GLU	66	-9.832 -19.744 -18.199 1.00 0.00
ATOM	574	N	ASP	67	-9.906 -17.646 -19.036 1.00 0.00
ATOM	575	CA	ASP	67	-11.114 -17.198 -18.359 1.00 0.00
ATOM	576	CB	ASP	67	-10.803 -16.790 -16.908 1.00 0.00
ATOM	577	CG	ASP	67	-9.897 -15.564 -16.801 1.00 0.00
ATOM	578		ASP	67	
ATOM	579		ASP	67	
	580	C		67	-8.686 -15.716 -17.079 1.00 0.00
ATOM ATOM			ASP.		-11.736 -16.043 -19.148 1.00 0.00 -12.975 -15.910 -19.049 1.00 0.00
ATOM	581 582		ASP	67	
		012	GUA		
ATOM ATOM	583 584	05'	GUA	68 68	-8.505 -41.295 10.827 1.00 0.00 -7.330 -40.867 10.171 1.00 0.00
	585		GUA		
ATOM				68 co	
ATOM	586	04' C1'		-68	-9.009 -39.506
ATOM	587		GUA	68 69	-9.110 -38.457  8.050  1.00  0.00
ATOM	588	N9	GUA	68 co	-10.316 -37.624 8.232 1.00 0.00
ATOM	589	C8	GUA	68 68	-10.739 -36.989 9.367 1.00 0.00
ATOM	590	N7	GUA		-11.859 -36.335
ATOM Atom	591	C5	GUA	68 69	-12.184 -36.520
	592	C6	GUA	68	
ATOM	593	06	GUA	68	-14.285 -35.434
ATOM	594	N1	GUA	68	-13.179 -36.332 5.773 1.00 0.00
ATOM	595	C2	GUA	68 68	-12.145 -37.055
ATOM	596	N2	GUA	68 69	-12.159 -37.246 3.894 1.00 0.00
ATOM	597	N3	GUA	68 69	-11.131 -37.558 5.932 1.00 0.00
ATOM	598	C4	GUA	68 68	-11.208 -37.253 7.255 1.00 0.00
ATOM	599	C3'	GUA	68 68	-6.915 -38.568 9.112 1.00 0.00 -7.850 -37.655 8.333 1.00 0.00
ATOM	600	C2'	GUA	68	-7.859 -37.655 8.332 1.00 0.00 -5.610 38.661 8.540 1.00 0.00
ATOM	601	03'	GUA	68 60	-5.619 -38.661  8.540  1.00  0.00
ATOM	602	P	THY	69	-4.682 -37.366 8.250 1.00 0.00

	591				<b>,</b> ,				592
ATOM	603	0P1	ТНУ	69	-3.317	-37.850	7.945	1.00	0.00
ATOM	604	0P2		69		-36.388	9.341	1.00	0.00
ATOM	605	05'	THY	69		-36.740	6.894	1.00	0.00
ATOM	606	C5'	THY	69		-37.558	5.761	1.00	0.00
ATOM	607	C4'	THY	69		-36.892	4.780	1.00	0.00
ATOM	608	04'	THY	69		-36.492	5.318	1.00	0.00
ATOM	609	C1'	THY	69		-35.346	4.646	1.00	0.00
ATOM	610	N1	THY	69		-34.654	5.515	1.00	0.00
ATOM	611	C6	THY	69		-34.504	6.853	1.00	0.00
ATOM	612	C5.	THY	69		-33.883	7.687	1.00	0.00
		C7		69		-33.737	9.137	1.00	0.00
ATOM	613		THY						
ATOM	614	C4	THY	69 co		-33.373	7.211	1.00	0.00
ATOM	615	04 N2	THY	69		-32.784	7.892	1.00	0.00
ATOM	616	N3	THY	69 60		-33.595	5.861	1.00	0.00
ATOM	617	C2	THY	69		-34.208	4.978	1.00	0.00
ATOM	618	02	THY	69		-34.334	3.794	1.00	0.00
ATOM	619	C3'	THY	69		-35.646	4.109	1.00	0.00
ATOM	620	C2'	THY	69		-34.561	4.508	1.00	0.00
ATOM	621	03'	THY	69		-35.821	2.704	1.00	0.00
ATOM	622	P	THY	70		-34.734	1.779	1.00	0.00
ATOM	623		THY	70		-35.422	0.610	1.00	0.00
ATOM	624		THY	70		-33.958	2.658	1.00	0.00
ATOM	625	05'		70		-33.742	1.292	1.00	0.00
ATOM	626	C5'	THY	70		-34.163	0.433	1.00	0.00
ATOM	627	C4'	THY	70		-33.145	0.513	1.00	0.00
ATOM	628	04'	THY	70		-32.987	1.860	1.00	0.00
ATOM	629	C1'	THY	70		-31.782	1.939	1.00	0.00
ATOM	630	N1	THY	70		-31.331	3.345	1.00	0.00
ATOM	631	C6	THY	70 <b>7</b> 0		-31.383	4.220	1.00	0.00
ATOM	632	C5	THY	70		-31.002	5.512	1.00	0.00
ATOM	633	C7	THY	70		-31.104	6.369	1.00	0.00
ATOM	634	C4	THY	70		-30.525	6.029	1.00	0.00
ATOM	635	04	THY	70		-30.145	7.177	1.00	0.00
ATOM	636	N3	THY	70		-30.508	5.089	1.00	0.00
ATOM	637	C2	THY	70		-30.828	3.748	1.00	0.00
ATOM	638	02	THY	70		-30.624	2.971	1.00	0.00
ATOM	639	C3'	THY	70		-31.727	0.070	1.00	0.00
ATOM	640	C2'	THY	70		-30.826	1.137	1.00	0.00
ATOM	641	03'	THY	70		-31.451	-1.230	1.00	0.00
ATOM	642	P	ADE	71		-30.090	-2.005	1.00	0.00
ATOM	643		ADE	71		-29.675	-1.556	1.00	0.00
ATOM	644		ADE	71		-30.274	-3.446	1.00	0.00
ATOM	645	05'	ADE	71		-29.004	-1.424	1.00	0.00
ATOM	646	C5'	ADE	71		-28.932	-1.820	1.00	0.00
ATOM	647	C4'	ADE	71		-27.762	-1.084	1.00	0.00
ATOM	648	04'	ADE	71		-28.090	0.282	1.00	0.00
ATOM	649	C1'	ADE	71		-26.971	1.077	1.00	0.00
ATOM	650	N9	ADE	71		-27.286	2.507	1.00	0.00
ATOM	651	C8	ADE	71		-27.910	3.053	1.00	0.00
ATOM	652	N7	ADE	71	-9.719	-27.863	4.350	1.00	0.00

	500				(200)				101m1 C
47011	593	05	, DE	71	10 000 /	7 000	4 701		594
ATOM	653	C5	ADE	71	-10.896 -2		4.701	1.00	0.00
ATOM	654	C6	ADE	71	-11.444 -2		5.948	1.00	0.00
ATOM	655	N6	ADE	71	-10.826 -2		7.090	1.00	0.00
ATOM	656	N1	ADE	71	-12.604 -2		5.984	1.00	0.00
ATOM	657	C2	ADE	71	-13.197 -7		4.830	1.00	0.00
ATOM	658	N3	ADE	71	-12.785 -7		3.592	1.00	0.00
ATOM	659	C4	ADE	71	-11.613 -		3.592	1.00	0.00
ATOM	660	C3'	ADE	71	-10.281 -		-1.053	1.00	0.00
ATOM	661	C2 <b>'</b>	ADE	71	-9.800 -		0.395	1.00	0.00
ATOM	662	03'	ADE	71	-11.056 -		-1.295	1.00	0.00
ATOM	663	P	GUA	72	-10.409 -		-1.492	1.00	0.00
ATOM	664	0P1	GUA	72	-9.085 -	23.837	-0.832	1.00	0.00
ATOM	665	0P2	GUA	72	-10.553 -	23.495	-2.909	1.00	0.00
ATOM	666	05'	GUA	72	-11.427 -	23.030	-0.609	1.00	0.00
ATOM	667	C5'	GUA	72	-12.806 -	22.975	-0.916	1.00	0.00
ATOM	668	C4'	GUA	72	-13.552 -	22.314	0.244	1.00	0.00
ATOM	669	04'	GUA	72	-13.265 -	23.023	1.441	1.00	0.00
ATOM	670	C1'	GUA	72	-12.744 -	22.150	2.425	1.00	0.00
ATOM	671	N9	GUA	72	-11.731 -	22.848	3.255	1.00	0.00
ATOM	672	C8	GUA	72	-10.572 -	23.462	2.847	1.00	0.00
ATOM	673	N7	GUA	72	-9.839 <b>-</b>	23.929	3.818	1.00	0.00
ATOM	674	C5	GUA	72	-10.575 -	23.630	4.959	1.00	0.00
ATOM	675	C6	GUA	72	-10.294 -	23.911	6.330	1.00	0.00
ATOM	676	06	GUA	72	-9.284 -	24.444	6.789	1.00	0.00
ATOM	677	N1	GUA	72	-11.329 -	23.532	7.178	1.00	0.00
ATOM	678	C2	GUA	72	-12.500 -	22.935	6.755	1.00	0.00
ATOM	679	N2	GUA	72	-13.392 -		7.683	1.00	0.00
ATOM	680	N3	GUA	72	-12.746 -			1.00	0.00
ATOM	681	C4	GUA	72	-11.754 -	23.008	4.622	1.00	0.00
ATOM	682	C3'	GUA	72	-13.105 -	20.865	0.468	1.00	0.00
ATOM	683	C2'	GUA	72	-12.104 -	21.028	1.610	1.00	0.00
ATOM	684	03'	GUA	72	-14.240 -	20.093	0.809	1.00	0.00
ATOM	685	P	GUA	73	-14.146 -		1.158	1.00	0.00
ATOM	686	0P1	GUA	73	-15.361 -		0.641	1.00	0.00
ATOM	687		GUA	73	-12.807 -		0.773	1.00	0.00
ATOM	688	05'	GUA	73	-14.228 -		2.763	1.00	0.00
ATOM	689	C5'	GUA	73	-15.396 -		3.413	1.00	0.00
ATOM	690	C4'	GUA	73	-15.247 -		4.930	1.00	0.00
ATOM	691	04'	GUA	73	-14.158 -		5.380	1.00	0.00
ATOM	692	C1'	GUA	73	-13.397 -		6.320	1.00	0.00
ATOM	693	N9	GUA	73	-12.009 -		6.329	1.00	0.00
ATOM	694	C8	GUA	73	-11.170 -		5.258	1.00	0.00
ATOM	695	N7	GUA	73	-10.051 -		5.536	1.00	0.00
ATOM	696	C5	GUA	73	-10.138 -		6.904	1.00	0.00
ATOM	697	C6	GUA	73	-9.225 -		7.779	1.00	0.00
ATOM	698	06	GUA	73	-8.131 -		7.494	1.00	0.00
ATOM	699	N1	GUA	73	-9.705 -		9.082	1.00	0.00
ATOM	700	C2	GUA	73	-10.923 -		9.499	1.00	0.00
ATOM	701	N2	GUA	73	-11.240 -		10.790	1.00	0.00
ATOM	702	N3	GUA	73	-11.778 -		8.681	1.00	0.00
.11081	. 02	1.0	3011	, 0	11.,,,	20.107			0.00

```
595
                                                                    596
                                                   7.400 1.00 0.00
ATOM
        703 C4
                  GUA
                         73
                                -11.333 -20.015
                         73
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        704
             C3'
                  GUA
                                 -14.953 -17.456
                                                    5.365
ATOM
        705
             C2'
                 GUA
                         73
                                -13.478 - 17.544
                                                    5.759
                                                          1.00
                                                                 0.00
             03'
ATOM
        706
                  GUA
                         73
                                 -15.819 -17.139
                                                    6.439
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  GUA
ATOM
        707
             P
                         74
                                 -15.814 -15.701
                                                    7.171
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        708
             0P1
                  GUA
                         74
                                -14.924 -14.780
                                                    6.429
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        709
             OP2 GUA
                         74
                                -17.215 -15.313
                                                    7.449
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        710
             05'
                  GUA
                         74
                                -15.105 -16.081
                                                    8.563
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        711
              C5'
                  GUA
                         74
                                -15.729 -16.972
                                                    9.470
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        712
             C4'
                  GUA
                         74
                                 -14.863 -17.157
                                                   10.717
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        713
              04'
                  GUA
                         74
                                 -13.605 -17.701
                                                   10.351
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        714
              C1'
                  GUA
                         74
                                 -12.563 -16.978
                                                   10.972
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        715
              N9
                  GUA
                         74
                                 -11.345 -17.074
                                                   10.134
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        716
              68
                  GUA
                         74
                                 -11.192 -16.708
                                                    8.820
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  GUA
ATOM
        717
              N7
                         74
                                 -10.060 -17.073
                                                    8.287
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        718
              C5
                  GUA
                         74
                                  -9.403 -17.721
                                                    9.325
                                                           1.00
                                                                  0.00
        719
              60
                  GUA
                         74
                                  -8.142 -18.389
                                                    9.334
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
ATOM
        720
              06
                  GUA
                         74
                                  -7.383 -18.576
                                                    8.388
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  GUA
                                  -7.816 -18.891
                                                                  0.00
ATOM
        721
              N1
                         74
                                                   10.588
                                                           1.00
ATOM
        722
              C2
                  GUA
                         74
                                  -8.631 -18.808
                                                   11.698
                                                           1.00
                                                                  0.00
              N2
                  GUA
                                  -8.170 -19.298
                                                   12.850
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        723
                         74
ATOM
        724
              N3
                  GUA
                          74
                                  -9.835 -18.220
                                                   11.680
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C4
                  GUA
                          74
                                 -10.166 -17.699
                                                   10.468
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         725
ATOM
         726
              C3'
                  GUA
                          74
                                 -14.578 -15.826
                                                   11.428
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C2'
ATOM
                  GUA
                                 -13.128 -15.561
                                                   11.023
                                                           1.00
                                                                  0.00
         727
                          74
ATOM
         728
              03'
                  GUA
                                 -14.758 -16.014
                                                   12.820
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          74
              P
                  THY
                          75
ATOM
         729
                                 -14.540 -14.832
                                                   13.896
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         730
              OP1 THY
                          75
                                 -15.488 -15.037
                                                   15.013
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         731
              OP2 THY
                         75
                                 -14.502 -13.535
                                                   13.185
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         732
              05' THY
                          75
                                 -13.059 -15.166
                                                   14.422
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C5' THY
ATOM
         733
                          75
                                 -12.802 -16.360
                                                   15.134
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C4' THY
ATOM
         734
                          75
                                 -11.300 -16.512
                                                   15.363
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         735
              04'
                  THY
                                 -10.622 -16.469
                                                   14.123
                                                                  0.00
                          75
                                                           1.00
ATOM
         736
              C1'
                  THY
                          75
                                  -9.363 -15.871
                                                   14.322
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  THY
ATOM
         737
              N1
                          75
                                  -8.790 -15.442
                                                   13.016
                                                           1.00
                                                                  0.00
              63
                  THY
ATOM
         738
                          75
                                  -9.523 -14.676
                                                   12.136
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  THY
ATOM
         739
              C5
                          75
                                  -9.082 -14.430
                                                   10.875
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  THY
         740
              C7
                          75
                                  -9.968 -13.548
                                                   10.016
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              C4
                  THY
ATOM
         741
                          75
                                  -7.834 - 14.981
                                                   10.388
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         742
              04
                  THY
                          75
                                  -7.387 -14.899
                                                    9.245
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         743
              N3
                  THY
                                  -7.129 -15.669
                                                   11.354
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          75
              C2
                  THY
ATOM
                          75
                                  -7.535 -15.929
                                                   12.652
                                                           1.00
                                                                  0.00
         744
ATOM
         745
              02
                  THY
                          75
                                  -6.803 -16.560
                                                   13.408
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C3' THY
ATOM
         746
                          75
                                 -10.699 -15.384
                                                   16.216
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         747
              C2' THY
                          75
                                  -9.734 -14.708
                                                   15.237
                                                            1.00
                                                                  0.00
              03' THY
                                 -10.059 -15.971
                                                   17.336
ATOM
         748
                          75
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         749
              P
                  THY
                          76
                                  -9.333 -15.099
                                                   18.482
                                                            1.00
                                                                  0.00
              OP1 THY
                                  -9.743 -13.684
 ATOM
         750
                          76
                                                   18.343
                                                            1.00
                                                                  0.00
              OP2 THY
                          76
                                  -9.505 -15.795
                                                   19.777
                                                                  0.00
 ATOM
         751
                                                            1.00
 ATOM
         752
              05' THY
                          76
                                  -7.791 -15.223 18.042 1.00
                                                                 0.00
```

```
597
                                                                    598
ATOM
        753 C5' THY
                         76
                                 -7.110 -16.460 18.127 1.00 0.00
ATOM
        754
             C4'
                 THY
                         76
                                 -5.690 -16.325
                                                  17.572
                                                          1.00
                                                                 0.00
             04'
                 THY
ATOM
        755
                         76
                                 -5.749 -15.954
                                                  16.205
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 THY
ATOM
        756
             C1'
                         76
                                 -4.781 -14.961
                                                  15.959
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        757
             N1
                 THY
                         76
                                 -5.080 -14.239
                                                  14.688
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 THY
ATOM
        758
             63
                         76
                                 -6.164 -13.396
                                                  14.579
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 THY
ATOM
        759
             C5
                         76
                                 -6.464 -12.780
                                                  13.407
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  THY
                                                                 0.00
ATOM
        760
             С7
                         76
                                 -7.684 -11.877
                                                  13.420
                                                          1.00
ATOM
        761
             C4
                  THY
                         76
                                 -5.663 -12.979
                                                  12.217
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
        762
             04
                         76
                                  -5.870 -12.479 11.113
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        763
             N3
                  THY
                         76
                                  -4.598 -13.841
                                                 12.403
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
        764
             C2
                                  -4.287 -14.518
                         76
                                                  13.571
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        765
             02
                  THY
                         76
                                  -3.360 -15.328
                                                  13.582
                                                                 0.00
                                                           1.00
             C3'
ATOM
        766
                 THY
                         76
                                  -4.878 -15.228
                                                  18.282
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        767
             C2'
                 THY
                         76
                                  -4.883 -14.117 17.231
                                                          1.00
                                                                 0.00
             03' THY
                         76
                                                                 0.00
ATOM
        768
                                  -3.566 -15.702
                                                  18.532
                                                          1.00
ATOM
        769
             P
                  ADE
                         77
                                  -2.576 -14.975
                                                  19.581
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP1 ADE
ATOM
        770
                         .77
                                  -2.401 -15.863
                                                  20.751
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP2 ADE
ATOM
        771
                         77
                                  -3.022 -13.578
                                                  19.770
                                                          1.00
                                                                 0.00
        772
             05'
                 ADE
                                  -1.200 -14.945
ATOM
                         77
                                                  18.752
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        773
             C5'
                  ADE
                                  -0.409 -16.106
                                                  18.597
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         77
ATOM
        774
             C4'
                  ADE
                         77
                                   0.604 - 15.893
                                                  17.471
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        775
             04'
                  ADE
                         77
                                  -0.104 -15.527
                                                  16.295
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C1'
ATOM
        776
                 ADE
                         77
                                   0.484 - 14.387
                                                  15.702
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        777
              N9
                  ADE
                         77
                                  -0.518 -13.600
                                                  14.947
                                                           1.00
                                                                 0.00
              68
                  ADE
ATOM
        778
                         77
                                  -1.652 -12.997
                                                  15.433
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        779
              N7
                  ADE
                         77
                                  -2.315 -12.302
                                                  14.552
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C5
                  ADE
ATOM
         780
                         77
                                  -1.563 -12.453
                                                  13.393
                                                           1.00
                                                                 0.00
              63
                  ADE
ATOM
         781
                         77
                                  -1.715 -11.945
                                                  12.087
                                                           1.00
                                                                 0.00
              N6
                  ADE
ATOM
         782
                          77
                                  -2.742 -11.164
                                                  11.749
                                                           1.00
                                                                 0.00
              N1
                  ADE
                                  -0.803 -12.273
                                                  11.150
ATOM
         783
                          77
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         784
              C2
                  ADE
                          77
                                   0.200 - 13.077
                                                  11.500
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         785
              N3
                  ADE
                                   0.449 - 13.634
                                                  12.684
                                                           1.00
                                                                  0.00
                         77
              C4
                  ADE
ATOM
         786
                          77
                                  -0.476 -13.260
                                                  13.612
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         787
              C3'
                  ADE
                          77
                                   1.605 -14.759
                                                  17.740
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C2' ADE
                          77
ATOM
         788
                                   0.994 -13.622
                                                  16.917
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         789
              03'
                  ADE
                          77
                                   2.887 -15.173
                                                  17.295
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         790
              P
                  GUA
                          78
                                   4.135 -14.159
                                                   17.219
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OP1 GUA
ATOM
         791
                          78
                                   3.877 -12.993
                                                   18.090
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         792
              OP2 GUA
                                   5.399 -14.915
                                                   17.367
                          78
                                                           1.00
                                                                 0.00
         793
              05' GUA
                                   4.035 -13.685
                                                   15.687
                                                                 0.00
ATOM
                          78
                                                           1.00
ATOM
         794
              C5'
                  GUA
                                   4.370 -14.561
                                                   14.625
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          78
                  GUA
ATOM
         795
              C4'
                          78
                                   5.128 -13.821
                                                   13.526
                                                           1.00
                                                                  0.00
              04'
                  GUA
ATOM
         796
                          78
                                   4.216 -13.070
                                                   12.752
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C1'
                  GUA
ATOM
         797
                          78
                                   4.505 -11.690
                                                   12.812
                                                           1.00
                                                                  0.00
         798
              N9
                  GUA
                                   3.208 -10.981
                                                   12.906
ATOM
                          78
                                                           1.00
                                                                  0.00
              63
                  GUA
                                   2.286 -11.012
                                                   13.924
ATOM
         799
                          78
                                                           1.00
                                                                  0.00
              N7
                  GUA
ATOM
         800
                          78
                                   1.152 -10.435
                                                   13.640
                                                                  0.00
                                                           1.00
              C5
                  GUA
ATOM
         801
                          78
                                   1.326
                                          -9.992
                                                   12.335
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         802
              6
                  GUA
                                          -9.300
                          78
                                   0.423
                                                  11.473 1.00
                                                                 0.00
```

```
599
                                                                  600
ATOM
        803
             06
                 GUA
                         78
                                 -0.707 -8.894 11.732
                                                         1.00 0.00
             N1
                 GUA
                         78
                                         -9.072
                                                 10.211
                                                          1.00
                                                               0.00
ATOM
        804
                                  0.963
ATOM
        805
             C2
                 GUA
                         78
                                  2.242
                                        -9.428
                                                  9.833
                                                          1.00
                                                                0.00
             N2
                 GUA
                         78
                                  2.649 - 9.083
                                                  8.610
                                                         1.00
ATOM
        806
                                                                0.00
ATOM
        807
             N3
                 GUA
                         78
                                  3.096 -10.065
                                                  10.646
                                                          1.00
                                                                0.00
                 GUA
             C4
                         78
                                  2.578 - 10.323
                                                 11.876
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        808
ATOM
        809
             C3'
                 GUA
                         78
                                  6.141 - 12.836
                                                 14.116
                                                          1.00
                                                                0.00
            C2'
                 GUA
        810
                         78
                                                 14.044
                                                          1.00
ATOM
                                  5.391 -11.506
                                                                0.00
             03'
                 GUA
ATOM
        811
                         78
                                  7.341 -12.887
                                                 13.368
                                                          1.00
                                                                0.00
        812 P
                 GUA
                         79
                                                 13.890
ATOM
                                  8.694 -12.184
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        813
            OP1 GUA
                                  9.834 -12.844
                                                 13.221
                         79
                                                          1.00
                                                                0.00
             OP2 GUA
                                                 15.375
                                                                0.00
ATOM
        814
                         79
                                  8.642 -12.143
                                                          1.00
             05'
                 GUA
                                  8.527 -10.701
                                                 13.284
ATOM
        815
                         79
                                                          1.00
                                                                0.00
        816
             C5'
                 GUA
                         79
                                  8.614 -10.495
                                                 11.884
ATOM
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        817
             C4'
                 GUA
                         79
                                  7.962
                                        -9.177
                                                 11.457
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        818
             04'
                  GUA
                         79
                                        -9.109
                                                 11.873
                                                         1.00
                                                                0.00
                                  6.614
                                                          1.00
ATOM
        819 C1'
                 GUA
                         79
                                  6.221
                                         -7.759
                                                 11.806
                                                                0.00
ATOM
        820
             N9
                  GUA
                         79
                                  4.962
                                         -7.556
                                                 12.562
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        821
             C8
                  GUA
                         79
                                  4.687
                                         -7.921
                                                  13.856
                                                          1.00
                                                                0.00
                  GUA
ATOM
        822 N7
                         79
                                  3.462
                                        -7.693
                                                 14.232 1.00
                                                                0.00
ATOM
        823 C5
                  GUA
                         79
                                  2.872 -7.124
                                                 13.109
                                                          1.00
                                                                0.00
             С6
                  GUA
                                         -6.673 12.908
ATOM
        824
                         79
                                  1.532
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        825
             06
                  GUA
                         79
                                  0.600
                                        -6.670
                                                  13.708
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        826
             N1
                  GUA
                         79
                                  1.323
                                         -6.190
                                                  11.623
                                                          1.00
                                                                0.00
                  GUA
                         79
                                                                0.00
ATOM
        827
             C2
                                  2.287
                                         -6.138
                                                  10.640
                                                          1.00
ATOM
        828
             N2
                  GUA
                         79
                                  1.907
                                         -5.680
                                                   9.446
                                                          1.00
                                                                0.00
             N3
                  GUA
                         79
                                  3.551
                                         -6.548
                                                  10.827
ATOM
        829
                                                          1.00
                                                                0.00
                  GUA
ATOM
        830
             C4
                         79
                                  3.780
                                         -7.034
                                                  12.080
                                                          1.00
                                                                0.00
             C3'
                  GUA
                                         -7.918
ATOM
        831
                         79
                                  8.627
                                                 12.030
                                                          1.00
                                                                0.00
        832
             C2'
                  GUA
                         79
                                  7.419 -7.066 12.450
                                                          1.00
ATOM
                                                                0.00
             03'
                  GUA
        833
                         79
                                  9.431
                                        -7.342 11.010 1.00
ATOM
                                                                0.00
ATOM
        834
             P
                  GUA
                         80
                                 10.259
                                         -5.967
                                                  11.207
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        835
             OP1 GUA
                         80
                                 11.374 - - 5.954
                                                  10.235
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        836
             OP2 GUA
                         80
                                 10.531
                                         -5.773
                                                 12.648
                                                          1.00
                                                                0.00
             05'
                                  9.183 -4.863
ATOM
        837
                  GUA
                         80
                                                 10.740
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        838
             C5'
                  GUA
                         80
                                  8.717 -4.822
                                                   9.405
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        839
             C4'
                  GUA
                                  7.517
                                         -3.881
                                                   9.294
                         80
                                                          1.00
                                                                0.00
                                                          1.00
ATOM
         840
             04'
                  GUA
                         80
                                  6.482
                                         -4.313
                                                  10.159
                                                                0.00
             C1'
                  GUA
                                         -3.176
ATOM
         841
                         80
                                  5.824
                                                  10.667
                                                          1.00
                                                                0.00
             N9
                  GUA
                                  5.051
                                         -3.515
ATOM
         842
                         80
                                                  11.881
                                                          1.00
                                                                0.00
                  GUA
ATOM
             С8
                                  5.506
                                         -4.054
                                                  13.057
         843
                         80
                                                          1.00
                                                                0.00
                  GUA
                                                  13.961
ATOM
         844
             N7
                         80
                                  4.585
                                         -4.226
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         845
             C5
                  GUA
                         80
                                  3.426
                                         -3.771
                                                  13.342
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         846
             С6
                  GUA
                                  2.089
                                         -3.710
                                                  13.831
                                                         1.00
                         80
                                                                0.00
ATOM
         847
             06
                  GUA
                         80
                                  1.658
                                         -4.069
                                                  14.925
                                                          1.00
                                                                0.00
             N1
                  GUA
                                  1.209
                                         -3.192
                                                  12.891
ATOM
         848
                         80
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         849
             C2
                  GUA
                         80
                                  1.561
                                         -2.781
                                                  11.624
                                                          1.00
                                                                 0.00
              N2
                                         -2.296
ATOM
         850
                  GUA
                         80
                                  0.590
                                                  10.847
                                                          1.00
                                                                0.00
              N3
                  GUA
                                         -2.836
ATOM
         851
                         80
                                  2.817
                                                  11.159
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             C4
                  GUA
         852
                         80
                                  3.700 - 3.341
                                                  12.063
                                                          1.00
                                                                0.00
```

	601								602
ATOM	853	C3'	GUA	80	7.833	-2.434	9.707	1.00	0.00
ATOM	854	C2'	GUA	80	7.004	-2.257	10.974	1.00	0.00
ATOM	855	03'	GUA	80	7.386	-1.528	8.721	1.00	0.00
ATOM	856	05'	CYT	81	-7.306	0.062	15.591	1.00	0.00
ATOM	857	C5'	CYT	81	-6.845	1.049	14.694	1.00	0.00
ATOM	858	C4'	CYT	81	-5.867	0.437	13.687	1.00	0.00
ATOM	859	04'	CYT	81	-4.818	-0.239	14.346	1.00	0.00
ATOM	860	C1'	CYT	81	-4.210	-1.072	13.384	1.00	0.00
ATOM	861	N1	CYT	81	-3.363	-2.109	14.020	1.00	0.00
ATOM	862	C6	CYT	81	-3.830	-2.808	15.106	1.00	0.00
ATOM	863	C5	CYT	81	-3.107	-3.798	15.676	1.00	0.00
ATOM	864	C4	CYT	81	-1.819	-4.072	15.105	1.00	0.00
ATOM	865	N4	CYT	81	-1.027	-5.012	15.624	1.00	0.00
ATOM	866	N3	CYT	81	-1.388	-3.408	14.027	1.00	0.00
ATOM	867	C2	CYT	81	-2.137	-2.433	13.444	1.00	0.00
ATOM	868	02	CYT	81	-1.725	-1.875	12.429	1.00	0.00
ATOM	869	C3'	CYT	81	-6.495	-0.630	12.778	1.00	0.00
ATOM	870	C2'	CYT	81	-5.417	-1.715	12.714	1.00	0.00
ATOM	871	03'	CYT	81	-6.799	-0.049	11.520	1.00	0.00
ATOM	872	P	CYT	82	-7.457	-0.892	10.308	1.00	0.00
ATOM	873	0P1	CYT	82	-8.272	0.035	9.493	1.00	0.00
ATOM	874	0P2	CYT	82	-8.073	-2.114	10.871	1.00	0.00
ATOM	875	05'	CYT	82	-6.170	-1.334	9.442	1.00	0.00
ATOM	876	C5'	CYT	82	-5.412	-0.388	8.710	1.00	0.00
ATOM	877	C4'	CYT	82	-4.245	-1.079	7.992	1.00	0.00
ATOM	878	04'	CYT	82	-3.421	-1.725	8.943	1.00	0.00
ATOM	879	C1'	CYT	82	-2.949	-2.954	8.433	1.00	0.00
ATOM	880	N1	CYT	82	-2.722	-3.871	9.579	1.00	0.00
ATOM	881	C6	CYT	82	-3.727	-4.040	10.493	1.00	0.00
ATOM	882	C5	CYT	82	-3.579	-4.814	11.586	1.00	0.00
ATOM	883	C4	CYT	82	-2.311	-5.465	11.751	1.00	0.00
ATOM	884	N4	CYT	82	-2.117	-6.298	12.774	1.00	0.00
ATOM	885	N3	CYT	82	-1.324	-5.299	10.857	1.00	0.00
ATOM	886	C2	CYT	82	-1.496	-4.516	9.750	1.00	0.00
ATOM	887	02	CYT	82	-0.587	-4.407	8.929	1.00	0.00
ATOM	888	C3'	CYT	82	-4.713	-2.162	7.007	1.00	0.00
ATOM	889	C2'	CYT	82	-4.116	-3.444	7.577	1.00	0.00
ATOM	890	03'	CYT	82	-4.242	-1.854	5.703	1.00	0.00
ATOM	891	P	CYT	83	-4.663	-2.712	4.396	1.00	0.00
ATOM	892		CYT	83	-5.900	-3.464	4.703	1.00	0.00
ATOM	893		CYT	83	-4.620	-1.813	3.222	1.00	0.00
ATOM	894	05'	CYT	83	-3.458	-3.772	4.260	1.00	0.00
ATOM	895	C5'	CYT	83	-2.178	-3.373	3.808	1.00	0.00
ATOM	896	C4'	CYT	83	-1.183	-4.527 -4.053	3.967	1.00	0.00
ATOM	897 898	04' C1'	CYT	83	-1.189	-4.953 -6.220	5.314	1.00	0.00
ATOM Atom	898 899	N1	CYT CYT	83 83	-0.904 -1.486	-6.330 -6.860	5.374	1.00	0.00
ATOM	900	N1	CYT	-83 83	-1.486 -2.805	-6.860 -6.621	6.631	1.00	0.00
ATOM	900	C5	CYT	83	-3.368	-6.987	6.909 8.078	1.00	0.00
ATOM	901	C4	CYT	83	-2.522	-0.98 <i>i</i> -7.664	9.017		
AIUM	902	64	CII	၀၁	-2.322	-1.004	9.017	1.00	0.00

```
603
                                                                    604
ATOM
        903
            N4 CYT
                                                          1.00 0.00
                         83
                                  -3.015 -8.082
                                                   10.183
ATOM
        904
             N3
                  CYT
                         83
                                  -1.230
                                          -7.898
                                                    8.745
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        905
             C2
                  CYT
                         83
                                  -0.676
                                         -7.502
                                                    7.563
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        906
             02
                  CYT
                         83
                                   0.511
                                         -7.727
                                                    7.343
                                                           1.00
                                                                  0.00
        907
             C3'
                  CYT
                                  -1.523
                                          -5.765
                                                    3.120
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
                         83
ATOM
        908
             C2'
                  CYT
                         83
                                  -1.633
                                          -6.888
                                                    4.154
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        909
             03'
                 CYT
                         83
                                  -0.489
                                          -5.961
                                                    2.168
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        910
             P
                  THY
                         84
                                  -0.485
                                          -7.182
                                                    1.106
                                                           1.00
                                                                  0.00
             OP1 THY
                                  -1.883 -7.567
                                                    0.815
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        911
                         84
              OP2 THY
                                   0.429
                                          -6.828
                                                   -0.002
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        912
                         84
ATOM
        913
              05' THY
                                   0.201 -8.366
                                                    1.956
                                                           1.00
                                                                  0.00
                         84
ATOM
              C5'
                  THY
                                   1.533
                                          -8.254
                                                           1.00
                                                                  0.00
        914
                         84
                                                    2.416
ATOM
        915
             C4'
                  THY
                         84
                                   1.858 - 9.393
                                                    3.384
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        916
              04'
                  THY
                                   1.042 -9.341
                                                    4.542
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         84
ATOM
        917
              C1'
                  THY
                                   0.936 -10.651
                                                    5.053
                                                           1.00
                                                                  0.00
                         84
ATOM
        918
              N1
                  THY
                                  -0.149 -10.743
                                                    6.075
                                                           1.00
                                                                  0.00
                         84
              c_6
                  THY
ATOM
        919
                         84
                                  -1.425 -10.334
                                                    5.765
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C5
                  THY
                                  -2.420 -10.374
ATOM
        920
                         84
                                                    6.684
                                                           1.00
                                                                  0.00
         921
              С7
                  THY
                                  -3.789 - 9.930
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
                          84
                                                    6.205
ATOM
        922
              C4
                  THY
                                  -2.185 -10.837
                                                    8.036
                                                            1.00
                                                                  0.00
                          84
              04
                  THY
                                  -3.027 -10.883
                                                                  0.00
ATOM
        923
                          84
                                                    8.926
                                                            1.00
ATOM
         924
              N3
                  THY
                          84
                                  -0.886 -11.252
                                                    8.278
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C2
                  THY
                                   0.155 - 11.218
                                                                  0.00
ATOM
         925
                          84
                                                    7.358
                                                            1.00
ATOM
         926
              02
                  THY
                                   1.272 -11.606
                                                    7.687
                                                            1.00
                                                                  0.00
                          84
              C3'
                  THY
                                   1.641 -10.791
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         927
                          84
                                                    2.777
ATOM
         928
              C2'
                  THY
                                   0.627 - 11.403
                                                    3.755
                                                            1.00
                                                                  0.00
                          84
              03' THY
ATOM
         929
                          84
                                   2.899 -11.445
                                                    2.734
                                                            1.00
                                                                  0.00
                                   3.109 -12.919
ATOM
         930
              P
                  ADE
                          85
                                                    2.116
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         931
              OP1 ADE
                          85
                                   4.558 -13.150
                                                    1.904
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         932
              OP2 ADE
                          85
                                   2.207 -13.123
                                                    0.959
                                                            1.00
                                                                  0.00
              05' ADE
ATOM
         933
                          85
                                   2.637 -13.871
                                                    3.311
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C5' ADE
ATOM
         934
                          85
                                   3.350 -13.895
                                                     4.529
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
              C4'
                  ADE
                                   2.537 -14.617
                                                            1.00
         935
                          85
                                                    5.598
                                                                  0.00
ATOM
         936
              04'
                  ADE
                          85
                                   1.335 -13.951
                                                     5.919
                                                            1.00
                                                                  0.00
                  ADE
ATOM
         937
              C1'
                          85
                                   0.550 - 14.890
                                                     6.614
                                                            1.00
                                                                  0.00
              N9
                  ADE
                                                                  0.00
ATOM
         938
                          85
                                  -0.850 - 14.442
                                                     6.756
                                                            1.00
                  ADE
ATOM
         939
              С8
                          85
                                  -1.685 -13.912
                                                     5.805
                                                            1.00
                                                                  0.00
              N7
                  ·ADE
                                  -2.870 -13.593
                                                                  0.00
ATOM
         940
                          85
                                                     6.249
                                                            1.00
ATOM
              C5
                  ADE
                                  -2.817 -13.946
                                                     7.594
                                                            1.00
                                                                  0.00
         941
                          85
                  ADE
ATOM
         942
              6
                          85
                                  -3.732 -13.828
                                                    8.658
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         943
              N6
                  ADE
                          85
                                  -4.947 -13.291
                                                     8.520
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         944
              N1
                  ADE
                                  -3.353 -14.256
                                                    9.874
                                                            1.00
                                                                  0.00
                          85
ATOM
         945
              C2
                  ADE
                          85
                                  -2.144 -14.780
                                                    10.030
                                                            1.00
                                                                  0.00
              N3
                  ADE
                                  -1.192 -14.946
ATOM
         946
                          85
                                                     9.123
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         947
              C4
                  ADE
                          85
                                  -1.594 -14.487
                                                     7.907
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         948
              C3'
                  ADE
                          85
                                    2.114 -16.034
                                                     5.198
                                                            1.00
                                                                   0.00
              C2'
                  ADE
ATOM
         949
                          85
                                   0.653 - 16.071
                                                     5.667
                                                            1.00
                                                                   0.00
              03'
                  ADE
 ATOM
         950
                                    3.009 -16.921
                                                     5.843
                                                            1.00
                                                                   0.00
                          85
ATOM
         951
              P
                   ADE
                          86
                                    2.766 -18.503
                                                     5.941
                                                            1.00
                                                                   0.00
ATOM
         952
              OP1 ADE
                          86
                                    1.847 -18.894
                                                     4.846
                                                           1.00
                                                                  0.00
```

					(304)					003-13
	605								606	
ATOM	953	OP2		86		-19.160	6.068	1.00	0.00	
ATOM	954		ADE	86		-18.600	7.351	1.00	0.00	
ATOM	955	C5'	ADE	86	2.524	-17.899	8.464	1.00	0.00	
ATOM	956	C4'	ADE	: 86		-18.453	9.800	1.00	0.00	
ATOM	957	04'	ADE	86	0.728	-17.996	10.059	1.00	0.00	
ATOM	958	C1'	ADE	86	-0.206	-19.055	9.994	1.00	0.00	
ATOM	959	N9	ADE	86	-1.365	-18.600	9.186	1.00	0.00	
ATOM	960	С8	ADE	86	-1.468	-18.435	7.825	1.00	0.00	
ATOM	961	N7	ADE	86	-2.570	-17.857	7.431	1.00	0.00	
ATOM	962	C5	ADE	86	-3.263	-17.638	8.614	1.00	0.00	
ATOM	963	C6	ADE	86	-4.513	-17.054	8.907	1.00	0.00	
ATOM	964	N6	ADE	86	-5.316	-16.522	7.983	1.00	0.00	
ATOM	965	N1	ADE	86	-4.891	-16.973	10.194	1.00	0.00	
ATOM	966	C2	ADE	86	-4.085	-17.429	11.143	1.00	0.00	
ATOM	967	N3	ADE	86	-2.883	-17.975	11.003	1.00	0.00	
ATOM	968	C4	ADE	86	-2.530	-18.072	9.690	1.00	0.00	
ATOM	969	C3,	ADE	. 86	1.987	-19.981	9.890	1.00	0.00	
ATOM	970	C2'	ADE	86	0.552	-20.262	9.437	1.00	0.00	
ATOM	971	03'	ADE	86	2.259	-20.320	11.238	1.00	0.00	
ATOM	972	P	CYT	87	2.342	-21.839	11.775	1.00	0.00	
ATOM	973	0P1	CYT	87	3.418	-21.896	12.794	1.00	0.00	
ATOM	974	0P2	CYT	87	2.381	-22.762	10.619	1.00	0.00	
ATOM	975	05'	CYT	87	0.904	-21.966	12.510	1.00	0.00	
ATOM	976	C5'	CYT	87	0.609	-21.193	13.661	1.00	0.00	
ATOM	977	C4'	CYT	87	-0.887	-21.116	13.974	1.00	0.00	
ATOM	978	04'	CYT	87	-1.592	-20.650	12.847	1.00	0.00	
ATOM	979	C1'	CYT	87	-2.927	-21.082	12.945	1.00	0.00	
ATOM	980	N1	CYT	87	-3.554	-21.033	11.600	1.00	0.00	
ATOM	981	C6	CYT	87	-2.848	-21.439	10.494	1.00	0.00	
ATOM	982	C5	CYT	87	-3.330	-21.257	9.244	1.00	0.00	
ATOM	983	C4	CYT	87	-4.605	-20.613	9.125	1.00	0.00	
ATOM	984	N4	CYT	87	-5.080	-20.274	7.929	1.00	0.00	
ATOM	985	N3	CYT	87	-5.312	-20.272	10.209	1.00	0.00	
ATOM	986	C2	CYT	87	-4.826	-20.483	11.462	1.00	0.00	
ATOM	987	02	CYT	87	-5.505	-20.173	12.437	1.00	0.00	
ATOM	988	C3'	CYT	87	-1.565	-22.433	14.382	1.00	0.00	
ATOM	989	C2'	CYT	87	-2.763	-22.514	13.435	1.00	0.00	
ATOM	990	03'	CYT	87	-1.936	-22.317	15.746	1.00	0.00	
ATOM	991	P	CYT	88	-2.530	-23.546	16.601	1.00	0.00	
ATOM	992	0P1	CYT	88	-2.307	-23.239	18.036	1.00	0.00	
ATOM	993	0P2	CYT	88	-1.975	-24.804	16.058	1.00	0.00	
ATOM	994		CYT	88	-4.111	-23.512	16.293	1.00	0.00	
ATOM	995	C5'	CYT	88	-4.944	-22.493	16.816	1.00	0.00	
ATOM	996	C4'	CYT	88	-6.298	-22.469	16.091	1.00	0.00	
ATOM	997	04'	CYT	88	-6.116	-22.263	14.707	1.00	0.00	
ATOM	998	C1'	CYT	88	-7.277	-22.709	14.045	1.00	0.00	
ATOM	999	N1	CYT	88	-6.977	-22.964	12.618	1.00	0.00	
ATOM	1000	C6	CYT	88	-5.824	-23.618	12.276	1.00	0.00	
ATOM	1001	C5	CYT	88	-5.454	-23.789	10.991	1.00	0.00	
ATOM	1002	C4	CYT	88	-6.346	-23.267	9.990	1.00	0.00	

```
607
                                                                   608
       1003 N4 CYT
                                 -6.049 -23.352
                                                         1.00 0.00
ATOM
                         88
                                                   8.692
ATOM
       1004
             N3
                 CYT
                         88
                                 -7.503 -22.683
                                                  10.330
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1005
            C2
                 CYT
                         88
                                 -7.858 -22.527
                                                  11.635
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1006
             02
                 CYT
                         88
                                 -8.943 -22.027
                                                  11.916
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C3,
                 CYT
                                 -7.119 -23.765
                                                  16.194
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1007
                         88
ATOM
       1008 C2' CYT
                         88
                                 -7.565 -24.025
                                                  14.754
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1009
             03' CYT
                         88
                                  -8.197 -23.547
                                                  17.092
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1010 P
                  CYT
                         89
                                  -9.348 - 24.645
                                                  17.376
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1011
             OP1 CYT
                         89
                                  -8.826 -25.978
                                                  17.002
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1012
             OP2 CYT
                         89
                                  -9.874 -24.417
                                                  18.740
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1013
             05' CYT
                         89
                                 -10.501 -24.244
                                                  16.316
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C5' CYT
ATOM
       1014
                         89
                                 -11.227 -23.032
                                                  16.436
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C4' CYT
ATOM
        1015
                         89
                                 -12.232 -22.886
                                                  15.285
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1016
             04' CYT
                         89
                                 -11.550 -22.933
                                                  14.047
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C1' CYT
                                                                 0.00
ATOM
        1017
                         89
                                 -12.347 -23.571
                                                  13.070
                                                           1.00
ATOM
        1018
             N1
                  CYT
                         89
                                 -11.444 -24.214
                                                  12.081
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C6
                  CYT
                                 -10.369 -24.933
                                                  12.535
                                                                 0.00
ATOM
        1019
                         89
                                                           1.00
             C5
                  CYT
                                  -9.431 -25.419
                                                  11.699
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1020
                         89
                  CYT
                                  -9.619 -25.158
                                                  10.300
                                                                 0.00
ATOM
        1021
              C4
                         89
                                                           1.00
        1022
              N4
                  CYT
                                  -8.719 -25.582
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         89
                                                    9.410
                                 -10.698 -24.501
ATOM
        1023
              N3
                  CYT
                                                    9.850
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1024
              C2
                  CYT
                         89
                                 -11.643 -24.029
                                                   10.714
                                                           1.00
                                                                 0.00
              02
                  CYT
                                 -12.646 -23.469
                                                                 0.00
ATOM
        1025
                         89
                                                   10.279
                                                           1.00
ATOM
        1026
              C3' CYT
                         89
                                 -13.279 -24.011
                                                   15.252
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C2'
                  CYT
ATOM
        1027
                                 -13.095 -24.632
                                                   13.869
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          89
ATOM
        1028
              03'
                  CYT
                          89
                                 -14.573 -23.463
                                                   15.453
                                                           1.00
                                                                 0.00
              P
                  THY
                                 -15.920 -24.364
                                                   15.464
ATOM
        1029
                          90
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1030
             OP1 THY
                          90
                                 -15.542 -25.781
                                                   15.666
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1031
              OP2 THY
                          90
                                 -16.897 -23.725
                                                   16.373
                                                           1.00
                                                                  0.00
              05' THY
                                 -16.463 -24.205
ATOM
        1032
                          90
                                                   13.953
                                                           1.00
                                                                  0.00
             C5' THY
                                 -16.895 -22.949
ATOM
        1033
                          90
                                                   13.460
                                                           1.00
                                                                  0.00
        1034
              C4' THY
                                 -17.221 -23.041
                                                   11.966
                                                                  0.00
ATOM
                          90
                                                           1.00
ATOM
        1035
              04'
                  THY
                          90
                                 -16.093 -23.552
                                                   11.281
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1036
              C1' THY
                          90
                                 -16.500 -24.482
                                                   10.302
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  THY
ATOM
        1037
              N1
                          90
                                 -15.376 -25.428
                                                   10.075
                                                           1.00
                                                                  0.00
              60
                  THY
                                 -14.882 -26.159
ATOM
        1038
                          90
                                                   11.128
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  THY
ATOM
        1039
              C5
                          90
                                 -13.770 -26.918
                                                   11.001
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  THY
 ATOM
        1040
              C7
                          90
                                 -13.348 -27.711
                                                   12.225
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C4
                  THY
                                 -13.033 -26.971
 ATOM
        1041
                          90
                                                    9.760
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
        1042
              04
                  THY
                          90
                                 -11.984 -27.584
                                                    9.590
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
        1043
              N3
                  THY
                          90
                                 -13.606 -26.239
                                                    8.729
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
        1044
              C2
                  THY
                                 -14.769 -25.486
                                                    8.820
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          90
 ATOM
        1045
              02
                  THY
                          90
                                 -15.221 -24.925
                                                    7.826
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C3' THY
                                 -18.396 -23.981
 ATOM
        1046
                          90
                                                   11.648
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
        1047
              C2' THY
                          90
                                 -17.714 -25.155
                                                   10.945
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
        1048
              03' THY
                          90
                                 -19.322 -23.296
                                                   10.819 1.00
                                                                  0.00
 ATOM
        1049
              P
                   ADE
                          91
                                 -20.756 -23.921
                                                   10.411
                                                           1.00
                                                                  0.00
              OP1 ADE
                                 -21.637 -22.813
 ATOM
        1050
                          91
                                                    9.986
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
        1051
              OP2 ADE
                          91
                                 -21.194 -24.839
                                                   11.486
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
        1052
              O5' ADE
                                 -20.396 -24.804
                                                    9.113 1.00
                                                                 0.00
                          91
```

	609								610	
ATOM	1053	C5'	ADE	91	-20.129 -2	4.194	7.866	1.00	0.00	
ATOM	1054	C4'	ADE	91	-19.553 -2	5.216	6.882	1.00	0.00	
ATOM	1055	04'	ADE	91	-18.320 -2	5.730	7.333	1.00	0.00	
ATOM	1056	C1'	ADE	91	-18.063 -2	6.879	6.562	1.00	0.00	
ATOM	1057	N9	ADE	91	-17.000 -2	7.689	7.184	1.00	0.00	
ATOM	1058	C8	ADE	91	-16.885 -2	8.061	8.497	1.00	0.00	
ATOM	1059	N7	ADE	91	-15.780 -2	8.699	8.777	1.00	0.00	
ATOM	1060	C5	ADE	91	-15.135 -2	8.783	7.545	1.00	0.00	
ATOM	1061	C6	ADE	91	-13.903 -2	9.331	7.136	1.00	0.00	
ATOM	1062	N6	ADE	91	-13.039 -2	9.889	7.989	1.00	0.00	
ATOM	1063	N1	ADE	91	-13.588 -2	9.302	5.827	1.00	0.00	•
ATOM	1064	C2	ADE	91	-14.439 -2	8.744	4.970	1.00	0.00	
ATOM	1065	N3	ADE	91	-15.599 -2	8.152	5.233	1.00	0.00	
ATOM	1066	C4	ADE	91	-15.894 -2	8.206	6.559	1.00	0.00	
ATOM	1067	C3'	ADE	91	-20.429 -2	6.460	6.663	1.00	0.00	
ATOM	1068	C2'	ADE	91	-19.402 -2	7.599	6.619	1.00	0.00	
ATOM	1069	03'	ADE	91	-21.164 -2	6.286	5.461	1.00	0.00	
ATOM	1070	P	ADE	92	-22.114 -2	7.430	4.829	1.00	0.00	
ATOM	1071	0P1	ADE	92	-23.108 -2	6.770	3.954	1.00	0.00	
ATOM	1072	0P2	ADE	92	-22.567 -2	8.328	5.914	1.00	0.00	
ATOM	1073		ADE	92	-21.089 -2	8.249	3.889	1.00	0.00	
ATOM	1074	C5'	ADE	92	-20.429 -2	7.618	2.808	1.00	0.00	
ATOM	1075		ADE	92	-19.368 -2		2.205	1.00	0.00	
ATOM	1076		ADE	92	-18.412 -2		3.191	1.00	0.00	
ATOM	1077	C1'	ADE	92	-18.053 -3		3.011	1.00	0.00	
ATOM	1078	N9	ADE	92	-17.482 -3		4.261	1.00	0.00	
ATOM	1079	С8	ADE	92	-18.036 -3		5.517	1.00	0.00	
ATOM	1080	N7	ADE	92	-17.269 -3		6.447	1.00	0.00	
ATOM	1081	C5	ADE	92	-16.127 -3		5.753	1.00	0.00	
ATOM	1082	C6	ADE	92	-14.924 -3		6.158	1.00	0.00	
ATOM	1083	N6	ADE	92	-14.689 -3		7.436	1.00	0.00	
ATOM	1084	N1	ADE	92	-13.993 -3		5.229	1.00	0.00	
MOTA	1085	C2	ADE	92	-14.246 -3		3.960	1.00	0.00	
ATOM	1086	N3	ADE	92	-15.328 -3		3.452	1.00	0.00	
ATOM ATOM	1087 1088	C4 C3'	ADE ADE	92	-16.249 -3 -19.948 -2		4.416	1.00	0.00	
ATOM	1089	C2'	ADE	92 92	-19.948 -2 -19.409 -3		1.670 2.683	1.00	0.00	
ATOM	1090	03'	ADE	92	-19.457 -3		0.357	1.00	0.00	
ATOM	1091	P	CYT	93	-19.956 -3		-0.574	1.00	0.00	
ATOM	1092		CYT	93	-20.091 -3		-1.962	1.00	0.00	
ATOM	1093		CYT	93	-21.100 -3		0.084	1.00	0.00	
ATOM	1094		CYT	93	-18.699 -3		-0.517	1.00	0.00	
ATOM	1095	C5'	CYT	93	-17.507 -3		-1.229	1.00	0.00	
ATOM	1096	C4'	CYT	93	-16.464 -3		-0.913	1.00	0.00	
ATOM	1097	04'	CYT	93	-16.255 -3		0.480	1.00	0.00	
ATOM	1098	C1'	CYT	93	-15.847 -3		0.856	1.00	0.00	
ATOM	1099	N1	CYT	93	-16.180 -3		2.288	1.00	0.00	
ATOM	1100	C6	CYT	93	-17.387 -3		2.778	1.00	0.00	
ATOM	1101	C5	CYT	93	-17.703 -3		4.086	1.00	0.00	
ATOM	1102	C4	CYT	93	-16.709 -3	34.884	4.945	1.00	0.00	

						(307)	-			特開2003-135087	
		611								612	
	ATOM			CYT	93	-16.895		6.264			
	ATOM	1104		CYT	93	-15.545	-35.331	4.456	1.00	0.00	
	ATOM	1105		CYT	93	-15.250	-35.226	3.131	1.00	0.00	
	ATOM	1106	02	CYT	93	-14.179	-35.653	2.706	1.00	0.00	
•	ATOM	1107	C3'	CYT	93	-16.926	-34.506	-1.289	1.00	0.00	
	ATOM	1108	C2 <b>'</b>	CYT	93	-16.693	-35.339	-0.030	1.00	0.00	
	ATOM	1109	03'	CYT	93	-16.162	-35.012	-2.363	1.00	0.00	
	END										
	HEADER	0000	00								
	REMARK		0.0	0545	1.68026	0.0255	4 0.01	776 1.	94175	1.83916	
	0.000	00									
	REMARK		2.7	2072	0.31403	0.4658	8 1.17	938 0.	76143		
	REMARK		0.0	1096	0.00692	0.0054	0.02	021 0	.00875		
	REMARK			116	111		5	0	0	0	
		0									
	REMARK			1378	305	46	0	273	340		
	REMARK		0.0	3779	0.14704	0.0356	4 0.04	441 0	.14193	0.14704	
	REMARK		2.8	9847	0.23587						
					_					_	
	REMARK			1	0		1	0	0	0	
	. =	0								2.22	
	ATOM		N	GLU	1			27.155		0.00	
	ATOM		CA		1		-6.496	27.409		0.00	
	ATOM		CB	GLU	1		-7.175	27.629		0.00	
	ATOM		CG	GLU	1	3.121	-6.688	28.920		0.00	
	ATOM		CD		1		-7.409				
	ATOM	6		GLU	1		-6.965	28.496			
	ATOM	7		GLU	1	1.799	-8.400	29.889			
	MOTA	8	C	GLU	1		-7.158	26.295			
	ATOM	9	0	GLU	1		-7.264	26.426		0.00	
	ATOM	10	N	LYS	2	5.290	-7.594	25.214			
	ATOM	11	CA	LYS	2	5.873	-8.264	24.053			
	ATOM	12	CB	LYS	2		-7.382	23.353			
	ATOM	13	CG	LYS	2		-8.043	22.152		0.00	
	ATOM	14		LYS	2		-8.437	21.021			
•	MOTA	15	CE	LYS	2		-8.806	19.765			
	ATOM	16	NZ	LYS	2		-9.195	18.638		0.00	
	ATOM	17	C	LYS	2		-9.652	24.446			
	ATOM	18	0	LYS	2		-10.653	24.110			
	ATOM	19	N	HIS	3		-9.701	25.160		0.00	
	ATOM	20	CA	HIS	3		-10.917	25.639			
	ATOM	21		HIS	3		-11.442				
	ATOM	22		HIS	3		-10.385	27.934		0.00	
	ATOM	23		HIS	3		-9.582			0.00	
	ATOM	24	CEI	HIS	3	7.714	-8.757	29.322	1.00	0.00	

	613							614
ATOM	25	NE2	HIS	3	6.407 -8.950	29.507	1.00	0.00
ATOM	26	CD2	HIS	3	6.090 -9.981	28.628	1.00	0.00
ATOM	27	C	HIS	3	8.306 -11.937	24.502	1.00	0.00
ATOM	28	0	HIS	3	8.635 -11.540	23.387	1.00	0.00
ATOM	29	N	ARG	4	8.069 -13.228	24.782	1.00	0.00
ATOM	30	CA	ARG	4	8.166 -14.326	23.828	1.00	0.00
ATOM	31	CB	ARG	4	7.083 -14.227	22.739	1.00	0.00
ATOM	32	CG	ARG	4	5.673 -14.296	23.339	1.00	0.00
ATOM	33	CD	ARG	4	4.609 -14.266	22.235	1.00	0.00
ATOM	34	NE	ARG	4	3.255 -14.349	22.800	1.00	0.00
ATOM	35	CZ	ARG	4	2.123 -14.392	22.078	1.00	0.00
ATOM	36		ARG	4	0.941 -14.514	22.696	1.00	0.00
ATOM	37		ARG	4	2.154 -14.314	20.744	1.00	0.00
ATOM	38	С	ARG	4	9.577 -14.399	23.241	1.00	0.00
ATOM	39	0	ARG	4	9.867 -13.765	22.229	1.00	0.00
ATOM	40	N	ALA	5	10.463 -15.181	23.872	1.00	0.00
ATOM	41	CA	ALA	5	11.846 -15.353	23.438	1.00	0.00
ATOM	42	СВ	ALA	5	12.690 -15.828	24.626	1.00	0.00
ATOM	43	C	ALA	5	11.948 -16.307	22.239	1.00	0.00
ATOM	44	0	ALA	5	12.717 -17.264	22.263	1.00	0.00
ATOM	45	N	ARG	6	11.164 -16.027	21.192	1.00	0.00
ATOM	46	CA	ARG	6	11.057 -16.738	19.930	1.00	0.00
ATOM	47	СВ	ARG	6	10.755 -18.240	20.120	1.00	0.00
ATOM	48	CG	ARG	6	9.442 -18.511	20.874	1.00	0.00
ATOM	49	CD	ARG	6	8.905 -19.915	20.564	1.00	0.00
ATOM	50	NE	ARG	6	8.466 -20.019	19.163	1.00	0.00
ATOM	51	CZ	ARG	6	7.959 -21.116	18.579	1.00	0.00
ATOM	52		ARG	.6	7.783 -22.255	19.259	1.00	0.00
ATOM	53		ARG	6	7.627 -21.071	17.287	1.00	0.00
ATOM	54	С	ARG	6	9.944 -16.061	19.127	1.00	0.00
ATOM	55	0	ARG	6	9.323 -15.108	19.595	1.00	0.00
ATOM	56	N	LYS	7	9.682 -16.577	17.926	1.00	0.00
ATOM	57	CA	LYS	7	8.636 -16.120	17.027	1.00	0.00
ATOM	58	CB	LYS	7	9.258 -15.318	15.873	1.00	0.00
ATOM	59	CG	LYS	7	9.768 -13.950	16.344	1.00	0.00
ATOM	60	CD	LYS	7	10.505 -13.182	15.238	1.00	0.00
ATOM	61	CE	LYS	7	9.667 -13.039	13.960	1.00	0.00
ATOM	62	NZ	LYS	7	10.190 -11.973	13.086	1.00	0.00
ATOM	63	C	LYS	7	7.933 -17.369	16.499	1.00	0.00
ATOM	64	0	LYS	7	8.395 -18.486	16.747	1.00	0.00
ATOM	65	N	ARG	8	6.831 -17.195	15.760	1.00	0.00
ATOM	66	CA	ARG	8	6.096 -18.298	15.157	1.00	0.00
ATOM	67	CB	ARG	8	4.966 -17.767	14.266	1.00	0.00
ATOM	68	CG	ARG	8	3.634 -17.755	15.018	1.00	0.00
ATOM	69	CD	ARG	8	2.539 -17.193	14.110	1.00	0.00
ATOM	70	NE	ARG	8	1.203 -17.483	14.641	1.00	0.00
ATOM	71	CZ	ARG	8	0.079 -16.881	14.230	1.00	0.00
ATOM	72	NH1	ARG	8	0.121 -15.963	13.260	1.00	0.00
ATOM	73	NH2	ARG	8	-1.092 -17.166	14.811	1.00	0.00
ATOM	74	C	ARG	8	7.057 -19.152	14.331	1.00	0.00

615 616 0 8.013 -18.633 13.752 1.00 0.00 ATOM 75 ARG 8 N GLN 9 6.807 -20.463 14.283 1.00 0.00 76 ATOM GLN 9 7.635 -21.398 13.536 1.00 0.00 CA ATOM 77 GLN 7.714 -22.780 14.212 1.00 0.00 ATOM CB9 78 CG GLN 9 6.403 -23.412 14.711 1.00 0.00 ATOM 79 CD GLN 6.663 -24.290 15.932 1.00 0.00 ATOM 80 9 OE1 GLN 9 6.844 -23.769 17.034 1.00 0.00 ATOM 81 6.702 -25.610 NE2 GLN ATOM 9 15.763 1.00 0.00 82 ATOM C GLN 9 7.194 -21.371 12.077 1.00 0.00 83 0 GLN 6.654 -22.341 11.548 **ATOM** 9 1.00 0.00 84 N ALA 7.451 -20.216 ATOM 85 10 11.449 1.00 0.00 7.147 -19.900 ATOM CA ALA 10.064 1.00 0.00 86 10 CB 0.00 ATOM ALA 7.629 -18.477 9.763 1.00 87 10 ATOM C ALA 7.792 -20.902 9.113 1.00 0.00 88 10 0 8.641 -21.697 ATOM ALA 9.517 1.00 0.00 89 10 N TRP 7.376 -20.872 ATOM 90 11 7.848 1.00 0.00 TRP 7.900 -21.794 1.00 0.00 ATOM CA 6.864 91 11 CBTRP 6.932 -21.955 1.00 ATOM 92 11 5.698 0.00 **ATOM** CGTRP 5.614 -22.608 6.007 1.00 0.00 93 11 CD1 TRP 4.697 -22.205 1.00 0.00 **ATOM** 94 11 6.916 ATOM NE1 TRP 3.609 -23.055 1.00 0.00 95 6.905 11 ATOM CE2 TRP 3.777 -24.060 5.976 1.00 0.00 96 11 CZ2 TRP 2.978 -25.141 **ATOM** 97 5.577 1.00 0.00 11 CH2 TRP 3.454 -26.012 ATOM 98 11 4.588 1.00 0.00 ATOM CZ3 TRP 4.712 -25.790 1.00 0.00 99 4.005 11 ATOM CE3 TRP 5.493 -24.693 4.397 1.00 0.00 100 11 ATOM CD2 TRP 5.052 -23.802 5.394 1.00 0.00 101 11 102 C TRP 9.278 -21.351 6.386 1.00 0.00 ATOM 11 ATOM 103 0 TRP 9.511 -20.177 6.105 1.00 0.00 11 ATOM 104 N LEU 12 10.182 -22.324 6.296 1.00 0.00 LEU 11.550 -22.139 ATOM 105 CA 12 5.831 1.00 0.00 ATOM 106 CBLEU 12 12.489 -23.117 6.559 1.00 0.00 CG LEU 12.906 -22.664 7.970 1.00 0.00 ATOM 107 12 CD1 LEU 12 11.717 -22.467 8.916 1.00 0.00 ATOM 108 ATOM 109 CD2 LEU 12 13.855 -23.710 8.567 1.00 0.00 110 C 11.558 -22.410 LEU 12 4.327 1.00 0.00 ATOM ATOM 111 0 LEU 12 10.576 -22.936 3.794 1.00 0.00 ATOM 112 N TRP 13 12.659 -22.071 3.634 1.00 0.00 12.736 -22.337 ATOM 113 CA TRP 13 2.204 1.00 0.00 TRP 14.063 -21.952 1.526 1.00 ATOM 114 CB 13 0.00 CG TRP 15.204 -22.845 1.893 1.00 0.00 ATOM 115 13 ATOM 116 CD1 TRP 15.801 -22.771 3.082 1.00 0.00 13 **ATOM** NE1 TRP 13 16.801 -23.708 3.203 1.00 0.00 CE2 TRP 16.881 -24.468 2.055 ATOM 118 13 1.00 0.00 CZ2 TRP 17.700 -25.542 1.680 1.00 0.00 ATOM 119 13 ATOM 120 CH2 TRP 13 17.516 -26.132 0.421 1.00 0.00 CZ3 TRP ATOM 13 16.526 -25.636 -0.4431.00 0.00 121 ATOM 122 CE3 TRP 13 15.715 -24.551 -0.0631.00 0.00 CD2 TRP 15.868 -23.940 ATOM 123 13 1.196 1.00 0.00ATOM С TRP 13 12.482 -23.818 1.988 1.00 124 0.00

					(310)			1911/11/2 ()
	617							618
ATOM	125	0	TRP	13	11.585 -24.134	1.242	1.00	0.00
ATOM	126	N	GLU	14	13.232 -24.733	2.611	1.00	0.00
ATOM	127	CA	GLU	14	13.047 -26.155	2.382	1.00	0.00
ATOM	128	CB	GLU	14	14.050 -26.964	3.205	1.00	0.00
ATOM	129	CG	GLU	14	14.039 -28.446	2.813	1.00	0.00
ATOM	130	CD	GLU	14	15.210 -29.189	3.448	1.00	0.00
ATOM	131	0E1	GLU	14	14.938 -30.062	4.299	1.00	0.00
ATOM	132	0E2	GLU	14	16.356 -28.863	3.068	1.00	0.00
ATOM	133	C	GLU	14	11.581 -26.573	2.500	1.00	0.00
ATOM	134	0	GLU	14	11.131 -27.397	1.713	1.00	0.00
ATOM	135	N	GLU	15	10.808 -25.988	3.422	1.00	0.00
ATOM	136	CA	GLU	15	9.396 -26.309	3.519	1.00	0.00
ATOM	137	CB	GLU	15	8.809 -25.797	4.839	1.00	0.00
ATOM	138	CG	GLU	15	9.534 -26.400	6.050	1.00	0.00
ATOM	139	CD	GLU	15	8.758 -26.127	7.331	1.00	0.00
ATOM	140	0E1	GLU	15	8.823 -24.973	7.802	1.00	0.00
ATOM	141	0E2	GLU	15	8.062 -27.055	7.801	1.00	0.00
ATOM	142	C	GLU	15	8.648 -25.799	2.273	1.00	0.00
ATOM	143	0	GLU	15	8.041 -26.600	1.567	1.00	0.00
ATOM	144	N	ASP	16	8.687 -24.491	1.972	1.00	0.00
ATOM	145	CA	ASP	16	8.008 -23.932	0.793	1.00	0.00
ATOM	146	CB	ASP	16	8.173 -22.401	0.750	1.00	0.00
ATOM	147	CG	ASP	16	7.202 -21.639	1.653	1.00	0.00
ATOM	148	0D1	ASP	16	6.474 -22.286	2.435	1.00	0.00
ATOM	149	0D2	ASP	16	7.161 -20.397	1.519	1.00	0.00
ATOM	150	C	ASP	16	8.535 -24.576	-0.500	1.00	0.00
ATOM	151	0	ASP	16	7.779 -25.141	-1.283	1.00	0.00
ATOM	152	N	LYS	17	9.848 -24.492	-0.702	1.00	0.00
ATOM	153	CA	LYS	17	10.654 -25.027	-1.787	1.00	0.00
ATOM	154	CB	LYS	17	12.161 -24.891	-1.410	1.00	0.00
ATOM	155	CG	LYS	17	13.072 -25.286	-2.584	1.00	0.00
ATOM	156	CD	LYS	17	13.273 -24.113	-3.554	1.00	0.00
ATOM	157	CE	LYS	17	14.202 -24.482	-4.718	1.00	0.00
ATOM	158	NZ	LYS	17	15.576 -24.785	-4.269	1.00	0.00
ATOM	159	C	LYS	17	10.260 -26.491	-2.069	1.00	0.00
ATOM	160	0	LYS	17	9.891 -26.841	-3.196	1.00	0.00
ATOM	161	N	ASN	18	10.343 -27.360	-1.053	1.00	0.00
ATOM	162	CA	ASN	18	10.018 -28.773	-1.206	1.00	0.00
ATOM	163	CB	ASN	. 18	10.551 -29.585	-0.018	1.00	0.00
ATOM	164	CG	ASN	18	10.701 -31.074	-0.302	1.00	0.00
ATOM	165		ASN	18	10.555 -31.527	-1.434	1.00	0.00
ATOM	166		ASN	18	11.040 -31.840	0.735	1.00	0.00
ATOM	167	C	ASN	18	8.520 -28.972	-1.446	1.00	0.00
ATOM	168	0	ASN	18	8.147 -29.806	-2.266	1.00	0.00
ATOM	169	N	LEU	19	7.651 -28.202	-0.774	1.00	0.00
ATOM	170	CA	LEU	19	6.207 -28.270	-0.978	1.00	0.00
ATOM	171	CB	LEU	19	5.483 -27.276	-0.050	1.00	0.00
ATOM	172	CG	LEU	19	3.986 -27.110	-0.353	1.00	0.00
ATOM	173		LEU	19	3.243 -28.438	-0.234	1.00	0.00
ATOM	174	CD2	LEU	19	3.360 -26.085	0.600	1.00	0.00

```
620
       619
                                                         1.00 0.00
ATOM
        175 C
                 LEU
                         19
                                  5.901 -28.001 -2.455
             0
                 LEU
                                                 -3.068
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        176
                         19
                                  5.130 -28.732
                 ARG
                         20
                                  6.523 - 26.965
                                                 -3.032 1.00
                                                                0.00
ATOM
        177
             N
                 ARG
                         20
                                  6.379 -26.586
                                                 -4.432
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        178
            CA
        179 CB
                 ARG
                                  7.240 -25.340 -4.700
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
                         20
ATOM
        180
             CC
                 ARG
                         20
                                  6.886 -24.613 -6.002
                                                          1.00
                                                                0.00
                 ARG
                                  7.778 -23.372 -6.162
ATOM
        181
             CD
                         20
                                                          1.00
                                                                0.00
                                                                0.00
ATOM
        182
             NE
                 ARG
                         20
                                  7.428 -22.596
                                                 -7.365
                                                          1.00
ATOM
        183
             CZ
                 ARG
                         20
                                  6.637 -21.507
                                                 -7.420
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        184
             NH1 ARG
                         20
                                  6.358 - 20.950
                                                  -8.606
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        185
             NH2 ARG
                         20
                                  6.100 -20.974
                                                  -6.316
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        186
             C
                 ARG
                         20
                                  6.749 - 27.784
                                                  -5.307
                                                          1.00
                                                                0.00
             0
                                  5.993 -28.163
                                                 -6.204
ATOM
        187
                 ARG
                         20
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        188
             N
                 SER
                         21
                                  7.900 -28.400
                                                 -5.016
                                                          1.00
                                                                0.00
             CA
                 SER
                         21
                                  8.375 -29.584
                                                  -5.721
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        189
ATOM
        190
             CB
                 SER
                         21
                                  9.760 -29.969
                                                  -5.183
                                                          1.00
                                                                 0.00
             0G
                 SER
                         21
                                  10.621 -28.845
                                                  -5.174
                                                                 0.00
ATOM
        191
                                                          1.00
ATOM
        192
             C
                  SER-
                         21
                                  7.370 -30.744
                                                  -5.584
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        193
             0
                  SER
                         21
                                  7.175 -31.529
                                                  -6.517
                                                                0.00
                                                          1.00
             N
                  GLY
                                  6.732 - 30.848
                                                                0.00
ATOM
        194
                         22
                                                  -4.412
                                                          1.00
        195 CA
                 GLY
                                                  -4.086
ATOM
                         22
                                  5.742 -31.859
                                                          1.00
                                                                0.00
             C
                  GLY
                         22
                                   4.494 -31.689
                                                  -4.939
ATOM
        196
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        197
             0
                  GLY
                         22
                                   4.091 -32.630
                                                  -5.615
                                                                0.00
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        198
             N
                  VAL
                         23
                                  3.888 -30.499
                                                  -4.929
                                                          1.00
ATOM
        199
             CA
                 VAL
                         23
                                  2.701 -30.219
                                                  -5.723
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        200
              CB
                 VAL
                         23
                                   2.193 -28.790
                                                  -5.460
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        201
              CG1 VAL
                         23
                                   1.060 -28.449
                                                  -6.437
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        202
              CG2 VAL
                         23
                                   1.665 -28.662
                                                  -4.026
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        203
             C
                  VAL
                         23
                                   3.004 -30.452
                                                  -7.202
                                                          1.00
                                                                 0.00
             0
                  VAL
                                   2.189 -31.040
                                                  -7.909
ATOM
        204
                         23
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N
                  ARG
                                   4.171 -30.000
                                                 -7.673
ATOM
        205
                         24
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        206
              CA
                  ARG
                                   4.566 -30.166
                                                 -9.062
                                                                 0.00
                         24
                                                          1.00
ATOM
         207
              CB
                  ARG
                         24
                                   5.939 -29.512
                                                  -9.289
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CG
                  ARG
ATOM
         208
                         24
                                   6.481 -29.673 -10.718
                                                          1.00
                                                                 0.00
         209
              CD
                  ARG
                                   5.518 -29.125 -11.779
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         24
              NE
                  ARG
                                   6.111 -29.191 -13.122
                                                                 0.00
ATOM
         210
                         24
                                                          1.00
ATOM
         211
              CZ
                  ARG
                                   5.450 -28.924 -14.261
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         24
              NH1 ARG
ATOM
         212
                         24
                                   4.162 -28.556 -14.226
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        213
              NH2 ARG
                         24
                                   6.081 -29.027 -15.438
                                                          1.00
                                                                 0.00
              C
ATOM
         214
                  ARG
                         24
                                   4.558 -31.637 -9.489
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         215
              0
                  ARG
                         24
                                   3.998 -31.965 -10.533
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                   5.190 -32.521
ATOM
         216
              N
                  LYS
                         25
                                                  -8.707
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         217
              CA
                  LYS
                         25
                                   5.279 -33.939
                                                  -9.054
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         218
              CB
                  LYS
                         25
                                   6.517 -34.547
                                                  -8.388
                                                                 0.00
                                                           1.00
ATOM
         219
              CG
                 LYS
                         25
                                   7.804 - 33.941
                                                  -8.967
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         220
              CD
                  LYS
                         25
                                   9.053 -34.720
                                                  -8.534
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CE
                 LYS
                         25
                                   9.187 -34.867
                                                  -7.014
                                                                 0.00
ATOM
         221
                                                           1.00
         222
              NZ LYS
                                   9.152 -33.566
                                                  -6.324
ATOM
                         25
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         223
              C
                  LYS
                         25
                                   4.040 - 34.778
                                                  -8.720
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         224
             0
                  LYS
                         25
                                   3.704 -35.684 -9.478 1.00
                                                                0.00
```

```
621
                                                                  622
        225 N
                        26
                                                         1.00 0.00
ATOM
                 TYR
                                  3.394 -34.528
                                                -7.578
ATOM
        226
            CA
                 TYR
                        26
                                  2.269 -35.321
                                                 -7.082
                                                         1.00
                                                               0.00
        227
             CB
                 TYR
                        26
ATOM
                                  2.463 -35.563
                                                 -5.576
                                                         1.00
                                                               0.00
             CG
                 TYR
ATOM
        228
                        26
                                  3.896 -35.883
                                                -5.169
                                                         1.00
                                                               0.00
        229
             CD1 TYR
                        26
ATOM
                                  4.691 - 36.745
                                                 -5.950
                                                         1.00
                                                               0.00
        230 CE1 TYR
ATOM
                        26
                                  6.017 - 37.016
                                                -5.577
                                                         1.00
                                                               0.00
            CZ TYR
ATOM
        231
                        26
                                  6.556 - 36.435
                                                 -4.417
                                                         1.00
                                                               0.00
             OH TYR
ATOM
        232
                        26
                                  7.844 - 36.702
                                                -4.061
                                                         1.00
                                                               0.00
        233
             CE2 TYR
ATOM
                        26
                                  5.766 - 35.581
                                                 -3.632
                                                         1.00
                                                                0.00
        234 CD2 TYR
ATOM
                         26
                                  4.441 -35.306
                                                -4.008
                                                         1.00
                                                                0.00
            C
                 TYR
ATOM
        235
                         26
                                  0.883 - 34.751 - 7.396
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        236
            0
                 TYR
                         26
                                 -0.076 -35.522
                                                -7.444
                                                         1.00
                                                                0.00
            N
                 GLY
ATOM
        237
                         27
                                  0.777 - 33.433
                                                 -7.607
                                                         1.00
                                                                0.00
        238 CA
                 GLY
                                                                0.00
ATOM
                         27
                                 -0.468 - 32.740
                                                -7.922
                                                         1.00
             C
                 GLY
ATOM
        239
                         27
                                 -0.971 -31.913 -6.739
                                                         1.00
                                                                0.00
             0
                 GLY
                                                                0.00
ATOM
        240
                         27
                                 -0.676 -32.225
                                                -5.585
                                                         1.00
                 GLU
ATOM
        241
            N
                         28
                                 -1.739 -30.853
                                                 -7.030
                                                         1.00
                                                                0.00
        242 CA
                 GLU
ATOM
                         28
                                 -2.315 -29.979
                                                 -6.015
                                                         1.00
                                                                0.00
                 GLU
ATOM
        243
             CB
                         28
                                 -2.741 -28.635
                                                 -6.640
                                                         1.00
                                                                0.00
        244
             CG
                 GLU
                         28
                                 -3.175 -27.611
                                                 -5.576
ATOM
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
                 GLU
                                 -3.467 -26.222
        245
             CD
                         28
                                                 -6.142
                                                         1.00
                                                                0.00
             OE1 GLU
ATOM
        246
                         28
                                 -2.599 -25.682
                                                 -6.863
                                                         1.00
                                                                0.00
             OE2 GLU
        247
                                 -4.528 -25.661
                                                 -5.795
ATOM
                         28
                                                         1.00
                                                                0.00
             C
                 GLU
ATOM
        248
                         28
                                 -3.485 -30.709
                                                 -5.350
                                                                0.00
                                                         1.00
                 GLU
                                 -4.105 -31.581
ATOM
        249
             0
                         28
                                                 -5.957
                                                         1.00
                                                                0.00
        250 N
                 GLY
ATOM
                         29
                                 -3.780 -30.355
                                                 -4.097
                                                         1.00
                                                                0.00
             CA
                 GLY
                                 -4.864 -30.960 -3.343
ATOM
        251
                         29
                                                         1.00
                                                                0.00
             C
                 GLY
ATOM
        252
                         29
                                 -4.561 -32.403 -2.954
                                                         1.00
                                                                0.00
             0
                 GLY
                                 -5.479 -33.206
ATOM
        253
                         29
                                                 -2.804
                                                         1.00
                                                                0.00
             N
                 ASN
ATOM
        254
                         30
                                 -3.275 -32.740 -2.793
                                                         1.00
                                                                0.00
        255
             CA
                 ASN
ATOM
                         30
                                 -2.812 -34.070 -2.419
                                                         1.00
                                                                0.00
        256
             CB
                 ASN
                         30
ATOM
                                 -2.156 -34.773 -3.615
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        257
             CG
                 ASN
                         30
                                 -3.048 -35.014 -4.834
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        258
             OD1 ASN
                         30
                                 -2.534 -35.271
                                                 -5.919
                                                                0.00
                                                         1.00
ATOM
        259
             ND2 ASN
                         30
                                 -4.371 -34.990
                                                 -4.689
                                                         1.00
                                                                0.00
             C
                  ASN
ATOM
        260
                         30
                                 -1.822 -33.902
                                                 -1.272
                                                         1.00
                                                                0.00
        261
             0
                  ASN
                         30
                                 -0.678 -34.360
                                                 -1.337
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
                  TRP
ATOM
        262
             N
                         31
                                 -2.272 -33.223
                                                 -0.215
                                                          1.00
                                                                0.00
             CA
                 TRP
ATOM
        263
                         31
                                 -1.467 - 32.940
                                                  0.963
                                                          1.00
                                                                0.00
             CB
                 TRP
ATOM
        264
                         31
                                 -2.161 -31.908
                                                   1.864
                                                          1.00
                                                                0.00
        265
             CG
                 TRP
                                 -2.967 -30.919
                                                                0.00
ATOM
                         31
                                                   1.080
                                                          1.00
ATOM
        266
             CD1 TRP
                         31
                                 -4.314 -30.799
                                                   1.074
                                                          1.00
                                                                0.00
             NE1 TRP
ATOM
        267
                         31
                                 -4.690 -29.799
                                                   0.196
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        268
             CE2 TRP
                         31
                                 -3.587 -29.226
                                                  -0.401
                                                          1.00
                                                                0.00
             CZ2 TRP
ATOM
        269
                         31
                                 -3.434 - 28.204
                                                 -1.345
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        270
             CH2 TRP
                         31
                                 -2.144 -27.852
                                                 -1.761
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             CZ3 TRP
                                 -1.023 -28.516
        271
                         31
                                                 -1.241
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        272
             CE3 TRP
                         31
                                 -1.187 -29.543
                                                  -0.299
                                                          1.00
                                                                0.00
             CD2 TRP
ATOM
         273
                         31
                                 -2.472 -29.922
                                                   0.147
                                                          1.00
                                                                0.00
         274 C
ATOM
                  TRP
                         31
                                 -1.047 -34.238
                                                   1.652 1.00
                                                                0.00
```

623 624 275 -0.002 -34.270 2.293 1.00 0.00 ATOM 0 TRP 31 ATOM 276 N SER 32 -1.829 -35.313 1.487 1.00 0.00 ATOM 277 CA SER 32 -1.519 -36.626 2.030 1.00 0.00 ATOM 278 CB SER 32 -2.685 -37.589 1.772 1.00 0.00 1.00 0G SER 32 -3.068 -37.569 0.409 0.00 ATOM 279 ATOM 280 C SER 32 -0.230 -37.126 1.376 1.00 0.00 281 0 SER 32 0.754 - 37.3872.067 1.00 0.00 ATOM ATOM 282 N LYS 33 -0.240 -37.2380.040 1.00 0.00 283 CA LYS 33 0.911 -37.673 -0.7421.00 0.00 ATOM ATOM 284 CB LYS 33 0.679 - 37.479-2.2511.00 0.00 ATOM 285 CG LYS 33 -0.478 -38.262 -2.8811.00 0.00 ATOM 286 CD LYS 33 -0.446 -37.954-4.3891.00 0.00 ATOM 287 CE LYS 33 -1.702 -38.408-5.1381.00 0.00ATOM 288 NZ LYS 33 -1.727 -37.849-6.5071.00 0.00 ATOM 289 C LYS 33 2.128 - 36.840-0.3441.00 0.00 ATOM 290 0 LYS 33 3.149 - 37.3790.075 1.00 0.00 N ILE 2.002 -35.516 -0.489ATOM 291 34 1.00 0.00 CA ILE 3.051 -34.555 -0.193ATOM 292 34 1.00 0.00 CBILE 2.513 -33.131 -0.414ATOM 293 34 1.00 0.00 CG2 ILE 3.505 -32.082 0.099 ATOM 294 34 1.00 0.00 ATOM 295 CG1 ILE 34 2.245 -32.899 -1.9131.00 0.00 CD1 ILE 1.358 -31.686 -2.188 1.00 ATOM 296 34 0.00 C 297 ILE 3.627 -34.771 1.208 1.00 0.00 ATOM 34 ATOM 298 0 ILE 4.843 -34.840 1.346 1.00 0.00 34 N LEU 35 2.776 -34.879 2.232 1.00 0.00 ATOM 299 **ATOM** CA LEU 3.193 -35.086 3.615 1.00 0.00 300 35 CBLEU 35 1.956 -35.016 ATOM 301 4.526 1.00 0.00 ATOM 302 CG LEU 35 2.258 -35.069 6.035 1.00 0.00 1.00 ATOM 303 CD1 LEU 35 1.177 -34.284 6.789 0.00 ATOM 304 CD2 LEU 35 2.267 -36.503 6.583 1.00 0.00 C LEU 3.968 -36.396 **ATOM** 305 35 3.774 1.00 0.00 0 LEU 4.963 -36.439 1.00 ATOM 306 35 4.495 0.00 ATOM 307 N LEU 3.519 -37.470 1.00 0.00 36 3.113 ATOM 308 CA LEU 36 4.173 -38.769 3.201 1.00 0.00 LEU ATOM 309 CB36 3.284 -39.855 2.575 1.00 0.00 CG LEU 2.003 -40.131 ATOM 310 36 3.385 1.00 0.00 ATOM 311 CD1 LEU 36 1.016 -40.917 2.515 1.00 0.00 CD2 LEU 2.294 -40.929 4.662 1.00 0.00 ATOM 312 36 C LEU 5.550 -38.729 2.536 1.00 ATOM 313 36 0.00 0 LEU 6.536 -39.157 ATOM 314 36 3.133 1.00 0.00 ATOM 315 N HIS 37 5.618 -38.220 1.302 1.00 0.00 ATOM CA HIS 37 6.856 - 38.1220.543 1.00 0.00 316 ATOM 317 CBHIS 37 6.559 -37.628 -0.8781.00 0.00 CG HIS 5.731 -38.569 -1.714ATOM 318 37 1.00 0.00 ATOM 319 ND1 HIS 37 6.123 - 39.870-1.9931.00 0.00 **ATOM** 320 CE1 HIS 37 5.164 -40.420 -2.7571.00 0.00 NE2 HIS 4.157 -39.582 ATOM 321 37 -3.0121.00 0.00 CD2 HIS -2.350ATOM 322 37 4.523 - 38.4151.00 0.00ATOM 323 С HIS 37 7.855 -37.176 1.208 1.00 0.00 ATOM 324 0 HIS 37 9.029 - 37.5151.342 1.00 0.00

					(314)			付用 Z U
	625							626
ATOM	325	N	TYR	38	7.387 -35.986	6 1.595	1.00	0.00
ATOM	326	CA	TYR	38	8.179 -34.93	1 2.203	1.00	0.00
ATOM	327	CB	TYR	38	8.203 -33.720	1.263	1.00	0.00
ATOM	328	CG	TYR	38	8.751 -33.973	3 -0.129	1.00	0.00
ATOM	329	CD1	TYR	38	8.098 -33.418	3 -1.247	1.00	0.00
ATOM	330	CE1	TYR	38	8.604 -33.63	7 -2.538	1.00	0.00
ATOM	331	CZ	TYR	38	9.764 -34.40	8 -2.718	1.00	0.00
ATOM	332	ОН	TYR	38	10.253 -34.61	5 -3.974	1.00	0.00
ATOM	333	CE2	TYR	38	10.417 -34.96	6 -1.607	1.00	0.00
ATOM	334		TYR	38	9.913 -34.74		1.00	0.00
ATOM	335	C	TYR	38	7.598 -34.510		1.00	0.00
ATOM	336	0	TYR	38	6.466 -34.04		1.00	0.00
ATOM	337	N	LYS	39	8.393 -34.659		1.00	0.00
ATOM	338	CA	LYS	39	8.002 -34.26		1.00	0.00
ATOM	339	CB	LYS	39	8.762 -35.10		1.00	0.00
ATOM	340	CG	LYS	39	8.362 -36.58		1.00	0.00
ATOM	341	CD	LYS	39	9.053 -37.44		1.00	0.00
ATOM	342	CE	LYS	39	8.640 -38.90		1.00	0.00
ATOM	343	NZ	LYS	39	9.289 -39.77		1.00	0.00
ATOM	344	C	LYS	39	8.259 -32.76		1.00	0.00
ATOM	345	0	LYS	39	8.942 -32.14		1.00	0.00
ATOM	346	N	PHE	40	7.696 -32.17		1.00	0.00
ATOM	347	CA	PHE	40	7.798 -30.76		1.00	0.00
ATOM	348	CB	PHE	40	6.531 -30.06		1.00	0.00
ATOM	349	CG	PHE	40	6.292 -30.15		1.00	0.00
ATOM	350		PHE	40	5.433 -31.13		1.00	0.00
ATOM	351		PHE	40	5.220 -31.19		1.00	0.00
ATOM	352	CZ	PHE	40	5.861 -30.28		1.00	0.00
ATOM	353		PHE	40	6.719 -29.31		1.00	0.00
ATOM	354		PHE	40	6.934 -29.24		1.00	0.00
ATOM	355	C	PHE	40	7.926 -30.60		1.00	0.00
ATOM	356	0	PHE	40	7.901 -31.60		1.00	0.00
ATOM	357	N	ASN	40	8.052 -29.36			
ATOM	358	CA	ASN	41	8.181 -29.07			
ATOM	359	CB	ASN	41	8.211 -27.55			0.00
ATOM	360	CG	ASN	41	9.436 -26.84		1.00	0.00
ATOM	361		ASN	41	10.367 -27.47		1.00	0.00
ATOM	362		ASN	41	9.442 -25.51		1.00	0.00
ATOM	363	C	ASN	41			1.00	0.00
ATOM	364	0			7.033 -29.69 7.255 -30.50		1.00	
ATOM	365		ASN	41 42	5.801 -29.30			$0.00 \\ 0.00$
		N CA	ASN		4.564 -29.73		1.00	
ATOM	366	CA	ASN ASN	42			1.00	0.00
ATOM	367	CB		42	4.457 -29.02		1.00	0.00
ATOM	368	CG	ASN	42 42	4.597 -27.50		1.00	
ATOM	369		ASN		5.675 -26.96		1.00	
ATOM	370		ASN	42	3.522 -26.80		1.00	
ATOM	371	C	ASN	42	3.374 -29.37		1.00	
ATOM	372	0 N	ASN	42	2.323 -28.95		1.00	
ATOM	373	N CA	ARG	43	3.546 -29.49		1.00	
ATOM	374	CA	ARG	43	2.529 -29.11	0 8.859	1.00	0.00

627 628 375 CB ARG 3.174 -28.596 7.568 1.00 0.00 ATOM 43 7.712 1.00 0.00 ATOM 376 CG ARG 43 3.844 -27.223 1.00 0.00 ATOM 377 CD ARG 43 4.824 -27.077 8.868 **ATOM** 378 NE ARG 43 5.708 -25.922 8.676 1.00 0.00 CZ ARG 5.682 -24.777 9.377 1.00 0.00 ATOM 379 43 ATOM 380 NH1 ARG 43 6.768 -24.003 9.375 1.00 0.00 NH2 ARG 4.597 -24.427 10.086 1.00 0.00 ATOM 381 43 ATOM 382 C ARG 43 1.563 - 30.2528.566 1.00 0.00 1.00 383 0 ARG 1.945 -31.278 8.009 ATOM 43 0.00 N THR 0.303 -30.031 8.937 1.00 0.00 ATOM 384 44 385 CA THR -0.821 -30.927 8.734 1.00 0.00 ATOM 44 CB THR -1.880 -30.5679.788 1.00 ATOM 386 0.00 44 ATOM 387 CG2 THR 44 -1.363 -30.801 11.212 1.00 0.00 ATOM 388 0G1 THR -2.232 -29.202 9.631 1.00 0.00 44 ATOM 389 C THR -1.404 - 30.6937.337 1.00 0.00 44 ATOM 390 0 THR -0.975 -29.7866.622 1.00 0.00 44 SER ATOM 391 N 45 -2.416 -31.4846.958 1.00 0.00 CA SER -3.115 -31.323 ATOM 392 45 5.688 1.00 0.00 CBSER -4.230 -32.371 ATOM 393 45 5.577 1.00 0.00 0G SER -4.994 -32.186 ATOM 394 45 4.404 1.00 0.00 ATOM 395 C SER 45 -3.667 -29.8915.617 1.00 0.00 396 0 SER -3.578 -29.236 4.581 1.00 ATOM 45 0.00 N VAL -4.209 -29.407 397 46 6.745 1.00 0.00 ATOM ATOM 398 CAVAL -4.752 -28.065 6.898 1.00 0.00 46 CB VAL -5.360 -27.906 ATOM 399 8.304 1.00 0.00 46 400 CG1 VAL 1.00 ATOM 46 -5.833 -26.468 8.546 0.00 CG2 VAL 401 -6.550 -28.856 1.00 ATOM 46 8.494 0.00 ATOM 402 C VAL -3.655 -27.029 6.636 1.00 0.00 46 ATOM 403 0 VAL -3.843 -26.141 5.809 1.00 0.00 46 ATOM 404 N MET 47 -2.513 -27.144 7.331 1.00 0.00 ATOM 405 CA MET 47 -1.393 - 26.2237.154 1.00 0.00 ATOM 406 CBMET 47 -0.208 -26.662 8.018 1.00 0.00 CG MET -0.356 -26.256 1.00 ATOM 407 47 9.484 0.00 ATOM 408 SD MET 47 -0.019 -24.501 9.777 1.00 0.00 **ATOM** 409 CE MET 47 0.107 -24.527 11.576 1.00 0.00 C -0.969 -26.160 ATOM 410 MET 47 5.687 1.00 0.00 MET ATOM 411 0 47 -0.850 -25.077 5.124 1.00 0.00 N LEU -0.745 -27.325ATOM 412 48 5.071 1.00 0.00 CA LEU -0.341 -27.441ATOM 413 48 3.676 1.00 0.00 LEU ATOM 414 CB 48 -0.202 -28.930 3.318 1.00 0.00 ATOM CGLEU 1.042 -29.549 3.974 1.00 0.00 415 48 ATOM CD1 LEU 0.911 -31.063 4.170 1.00 0.00 416 48 ATOM 417 CD2 LEU 48 2.281 -29.294 3.113 1.00 0.00 C -1.348 - 26.721ATOM 418 LEU 48 2.773 1.00 0.00 ATOM 419 0 LEU 48 -0.965 -25.8881.952 1.00 0.00 **ATOM** 420 N LYS -2.633 -27.038 1.00 0.00 49 2.945 ATOM 421 CALYS 49 -3.744 -26.459 2.207 1.00 0.00 422 CBLYS -5.047 -27.062 2.765 0.00 ATOM 49 1.00 CG LYS 49 -6.357 -26.302 2.509 1.00 0.00 ATOM 423 **ATOM** 424 CDLYS 49 -7.024 -26.595 1.167 1.00 0.00

	629			•	(010)			630
ATOM	425	CE	LYS	49	-6.373 -25.970	-0.069	1.00	630 0.00
ATOM	426	NZ	LYS	49	-7.164 -26.262	-1.284	1.00	0.00
ATOM	427	C	LYS	49	-3.741 -24.928	2.286	1.00	
ATOM	428	0	LYS	49 49	-3.656 -24.256		1.00	0.00
ATOM	429	N	ASP	50	-3.866 -24.230	1.257 3.499	1.00	0.00
ATOM	430	CA	ASP	50				
		CB	ASP		-3.940 -22.931	3.685	1.00	0.00
ATOM Atom	431	CG	ASP	50 50	-4.449 -22.566	5.085	1.00	0.00
	432			50 50	-3.373 -22.559	6.158	1.00	0.00
ATOM	433		ASP ASP	50 50	-3.443 -23.422	7.059	1.00	0.00
ATOM	434	C		50 50	-2.554 -21.617	6.106	1.00	0.00
ATOM	435		ASP	50 50	-2.654 -22.215	3.262	1.00	0.00
ATOM	436	0 N	ASP	50	-2.726 -21.143	2.667	1.00	0.00
ATOM	437	N CA	ARG	51	-1.480 -22.796	3.533	1.00	0.00
ATOM	438	CA	ARG	51	-0.215 -22.195	3.133	1.00	0.00
ATOM	439	CB CG	ARG	51 51	0.973 -22.932	3.750	1.00	0.00
ATOM	440		ARG	51 51	2.212 -22.037	3.641	1.00	0.00
ATOM Atom	441	CD NE	ARG ARG	51 51	2.980 -22.217	2.335	1.00	0.00
ATOM	442 443	CZ	ARG	51	3.970 -21.154	2.218	1.00	0.00
	443		ARG	51	3.761 -19.885	1.834	1.00	0.00
ATOM			ARG	51 51	2.531 -19.456		1.00	0.00
ATOM Atom	445 446	C	ARG	51 51	4.802 -19.048 -0.151 -22.107		1.00	0.00
ATOM	447	0	ARG	51	0.217 -21.057		1.00	0.00
ATOM	448	N	TRP	52	-0.508 -23.186		1.00	0.00
ATOM	449	CA	TRP	52 52	-0.494 -23.187		1.00	0.00
ATOM	450	CB	TRP	52 52	-0.845 -24.578		1.00	0.00
ATOM	451	CG	TRP	52	-0.609 -24.749		1.00	0.00
ATOM	452		TRP	52	-1.562 -24.826		1.00	0.00
ATOM	453		TRP	52	-0.973 -24.995		1.00	0.00
ATOM	454		TRP	52	0.400 -25.025		1.00	0.00
ATOM	455		TRP	52	1.423 -25.169		1.00	0.00
ATOM	456		TRP	52	2.757 -25.149		1.00	0.00
ATOM	457		TRP	52	3.050 -24.995		1.00	0.00
ATOM	458		TRP	52	2.013 -24.857	-2.804	1.00	0.00
ATOM	459		TRP	52	0.662 -24.866		1.00	0.00
ATOM	460	С	TRP	52	-1.460 -22.134		1.00	0.00
ATOM	461	0	TRP	52	-1.129 -21.410		1.00	0.00
ATOM	462	N	ARG	53	-2.646 -22.038		1.00	0.00
ATOM	463	CA	ARG	53	-3.654 -21.051		1.00	0.00
ATOM	464	CB	ARG	53	-4.888 -21.248	0.069	1.00	0.00
ATOM	465	CG	ARG	53	-6.004 -20.234	-0.211	1.00	0.00
ATOM	466	CD	ARG	53	-7.223 -20.515	0.675	1.00	0.00
ATOM	467	NE	ARG	53	-6.904 -20.390	2.107	1.00	0.00
ATOM	468	CZ	ARG	53	-7.783 -20.594	3.102	1.00	0.00
ATOM	469	NH1	ARG	53	-7.410 -20.453	4.380	1.00	0.00
ATOM	470	NH2	ARG	53	-9.046 -20.932	2.825	1.00	0.00
ATOM	471	C	ARG	53	-3.043 -19.651	-0.693	1.00	0.00
ATOM	472	0	ARG	53	-3.142 -18.852	-1.621	1.00	0.00
ATOM	473	N	THR	54	-2.390 -19.361	0.441	1.00	0.00
ATOM	474	CA	THR	54	-1.732 -18.082	0.674	1.00	0.00

631 632 ATOM 475 CB THR 54 -1.121 -18.0312.083 1.00 0.00 CG2 THR 1.00 0.00 ATOM 476 54 -0.394 - 16.7042.307 OG1 THR -2.135 -18.159 ATOM 477 54 3.057 1.00 0.00C THR -0.670 -17.831 ATOM 478 54 -0.4001.00 0.00 479 0 THR -0.568 - 16.722 - 0.9141.00 ATOM 54 0.00 ATOM 480 N MET 55 0.122 - 18.851-0.7491.00 0.00 CAMET 55 1.157 -18.721 -1.7631.00 0.00 ATOM 481 MET 1.00 0.00 ATOM 482 CB55 1.947 -20.038 -1.875CG MET 3.403 -19.772 -2.272ATOM 483 55 1.00 0.00 MET -2.493ATOM 484 SD 55 4.453 -21.230 1.00 0.00 ATOM 485 CE MET 55 3.762 -21.844 -4.044 1.00 0.00C MET ATOM 486 55 0.525 - 18.294-3.0951.00 0.00 0 MET ATOM 55 0.932 - 17.305-3.7031.00 0.00 487 N LYS 1.00 ATOM 488 56 -0.489 - 19.038-3.5450.00 CA LYS 56 -1.210 -18.771 -4.7821.00 0.00 ATOM 489 ATOM 490 CBLYS 56 -2.220 -19.903 -5.0301.00 0.00 CG LYS ATOM 491 56 -1.522 -21.058 -5.742 1.00 0.00 ATOM 492 CD LYS -2.382 -22.316 -5.890 1.00 0.00 56 CE LYS ATOM 493 56 -3.639 -22.088 -6.7361.00 0.00 **ATOM** 494 NZ LYS -4.232 -23.370 -7.170 1.00 0.00 56 C LYS -1.963 -17.434 -4.7600.00 ATOM 495 56 1.00 ATOM 496 0 LYS 56 -2.181 -16.876 -5.832 1.00 0.00 N LYS ATOM 57 -2.361 -16.937 -3.5721.00 0.00 497 ATOM 498 CALYS 57 -3.104 -15.688 -3.3551.00 0.00 ATOM 499 CBLYS 57 -2.928 -15.209 -1.9081.00 0.00 CG ATOM 500 LYS 57 -3.916 -14.103 -1.5031.00 0.00 CDLYS ATOM 501 57 -3.477 -13.445 -0.1831.00 0.00 CE LYS -2.443 -12.327 -0.397ATOM 502 57 1.00 0.00 **ATOM** NZ LYS 503 57 -3.069 -11.069 -0.8481.00 0.00 **ATOM** 504 C LYS -2.669 -14.581 -4.31357 1.00 0.00 **ATOM** 505 0 LYS 57 -3.514 -13.890 -4.8781.00 0.00 ATOM 506 N LEU 58 -1.351 -14.430 -4.496 1.00 0.00 LEU ATOM 507 CA 58 -0.780 -13.469-5.4211.00 0.00 CBLEU ATOM 508 58 0.665 - 13.146-4.9961.00 0.00 CG LEU 0.776 - 12.565-3.574ATOM 509 58 1.00 0.00 CD1 LEU 2.256 -12.405 -3.2111.00 0.00 ATOM 510 58 ATOM CD2 LEU 0.068 - 11.211-3.435511 58 1.00 0.00 С LEU ATOM 512 -0.918 -14.121 -6.8030.00 58 1.00 **ATOM** 513 0 LEU -2.026 -14.184 -7.3301.00 0.00 58 ATOM 514 N LYS 59 0.174 - 14.638-7.376 1.00 0.00 ATOM 515 CA LYS 59 0.206 - 15.358-8.647 1.00 0.00 ATOM CBLYS 516 59 0.217 -14.403 -9.861 1.00 0.00 ATOM 517 CG LYS 59 -1.071 -13.606 -10.134 1.00 0.00 ATOM 518 CDLYS 59 -2.332 -14.453 -10.385 1.00 0.00 ATOM 519 CE LYS 59 -2.244 -15.309 -11.654 1.00 0.00 NZ ATOM 520 LYS 59 -3.510 -16.024 -11.910 1.00 0.00 C LYS -8.631 ATOM 521 59 1.460 -16.243 1.00 0.00 ATOM 522 0 LYS 2.138 -16.385 -9.647 59 1.00 0.00ATOM 523 N LEU 60 1.787 -16.829 -7.470 1.00 0.00 ATOM 524 CA LEU 60 2.980 -17.654 -7.324 1.00 0.00

```
633
                                                                  634
ATOM
        525
            CB LEU
                        60
                                 3.414 -17.768 -5.855 1.00 0.00
ATOM
             CG
                 LEU
        526
                        60
                                  3.692 -16.393
                                                -5.206
                                                        1.00 0.00
            CD1 LEU
ATOM
        527
                        60
                                  4.200 -16.560 -3.769 1.00 0.00
            CD2 LEU
                                                        1.00
ATOM
        528
                        60
                                  4.731 -15.571
                                                 -5.983
                                                               0.00
            C
                 LEU
ATOM
        529
                        60
                                  2.905 -18.994
                                                 -8.059
                                                        1.00
                                                               0.00
            0
ATOM
        530
                 LEU
                        60
                                  3.950 -19.586
                                                 -8.339
                                                         1.00
                                                               0.00
             N
                 ILE
                                                 -8.386
ATOM
        531
                        61
                                  1.694 -19.459
                                                         1.00
                                                               0.00
            CA
                 ILE
                                  1.417 -20.681
                                                -9.135
ATOM
        532
                        61
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        533
            CB
                 ILE
                        61
                                  1.190 -21.904
                                                -8.213
                                                         1.00
                                                               0.00
            CG2 ILE
                                  0.898 -23.184 -9.011
ATOM
        534
                        61
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        535
            CG1 ILE
                        61
                                  2.308 -22.142 -7.194
                                                         1.00
                                                               0.00
        536
            CD1 ILE
                                                -7.806
ATOM
                        61
                                  3.547 -22.784
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        537
             C
                 ILE
                        61
                                  0.170 -20.389
                                                -9.975
                                                         1.00
                                                               0.00
                                                         1.00
        538
            0
                 ILE
                                 -0.590 -19.470 -9.657
ATOM
                        61
                                                               0.00
ATOM
        539
             N
                 SER
                         62
                                 -0.044 -21.174 -11.036
                                                        1.00 0.00
                                                         1.00 0.00
ATOM
        540
             CA
                 SER
                         62
                                 -1.201 -21.049 -11.906
ATOM
        541
             CB
                 SER
                         62
                                 -1.147 -22.136 -12.985
                                                         1.00
                                                               0.00
            0G
ATOM
        542
                 SER
                         62
                                 -0.822 -23.387 -12.413
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        543
             C
                  SER
                         62
                                 -2.482 -21.129 -11.068
                                                         1.00 0.00
             0
                  SER
ATOM
        544
                         62
                                 -2.560 -21.882 -10.096
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        545
             N
                  SER
                         63
                                 -3.475 -20.323 -11.443
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        546
            CA
                 SER
                         63
                                 -4.755 -20.222 -10.763
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        547 CB
                 SER
                         63
                                 -4.727 -19.063 -9.750
                                                         1.00
                                                               0.00
            OG
                  SER
ATOM
        548
                         63
                                 -3.696 -18.129 -10.034
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        549
             C
                  SER
                         63
                                 -5.854 -20.052 -11.809
                                                          1.00
                                                                0.00
        550 0
                  SER
ATOM
                         63
                                 -5.643 -19.410 -12.839
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        551 N
                  ASP
                         64
                                 -7.014 -20.648 -11.527
                                                          1.00
                                                               0.00
        552 CA
                 ASP
                                 -8.211 -20.648 -12.353
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
                         64
ATOM
        553 CB
                 ASP
                         64
                                 -9.159 -21.721 -11.799
                                                         1.00
                                                               0.00
             CG
                 ASP
                                                         1.00
ATOM
        554
                         64
                                 -9.512 -21.424 -10.345
                                                               0.00
             OD1 ASP
ATOM
        555
                         64
                                -10.629 -20.912 -10.119
                                                         1.00
                                                               0.00
             OD2 ASP
ATOM
        556
                                 -8.626 -21.677 -9.497
                                                         1.00
                         64
                                                               0.00
ATOM
        557
             C
                  ASP
                                 -8.897 -19.279 -12.354
                                                         1.00
                                                               0.00
                         64
ATOM
        558
             0
                  ASP
                                 -8.491 -18.365 -11.637
                                                          1.00
                                                               0.00
                         64
        559 N
                  SER
ATOM
                         65
                                 -9.947 -19.154 -13.174
                                                         1.00
                                                                0.00
        560 CA
                  SER
ATOM
                         65
                                -10.744 -17.947 -13.321
                                                          1.00
                                                               0.00
                                 -9.930 -16.855 -14.034
         561
             CB
                  SER
ATOM
                         65
                                                         1.00
                                                                0.00
                                                          1.00
ATOM
         562
             OG
                  SER
                         65
                                -10.647 -15.637 -14.061
                                                                0.00
             С
                  SER
ATOM
         563
                         65
                                -12.023 -18.295 -14.088
                                                          1.00
                                                                0.00
             0
                  SER
ATOM
         564
                         65
                                -12.035 -18.247 -15.316
                                                          1.00
                                                                0.00
             N
                  GLU
ATOM
         565
                         66
                                -13.088 -18.644 -13.354
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             \mathsf{CA}
                  GLU
         566
                         66
                                -14.395 -19.004 -13.893
                                                          1.00
                                                                0.00
             CB
                  GLU
ATOM
         567
                         66
                                -15.056 -17.776 -14.547
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
         568
             CG
                  GLU
                         66
                                -16.555 -17.988 -14.795
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
             CD GLU
         569
                         66
                                -17.207 -16.717 -15.331
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
         570
             OE1 GLU
                         66
                                -17.546 -15.857 -14.490
                                                          1.00
                                                               0.00
             OE2 GLU
ATOM
         571
                                -17.351 -16.624 -16.569
                                                          1.00
                                                                0.00
                         66
             C
                  GLU
ATOM
         572
                         66
                                -14.299 -20.224 -14.819
                                                          1.00
                                                                0.00
             0
                  GLU
ATOM
         573
                         66
                                -14.323 -20.092 -16.041
                                                          1.00
                                                               0.00
         574 N
                  ASP
ATOM
                         67
                                -14.194 -21.412 -14.214 1.00 0.00
```

635 636 1.00 0.00 ATOM 575 CA ASP 67 -14.102 -22.698 -14.890 ATOM 576 CB ASP 67 -12.637 -22.998 -15.237 1.00 0.00 **ATOM** 577 CC ASP 67 -12.483 -24.323 -15.978 1.00 0.00 ATOM 578 OD1 ASP 67 -11.885 -25.247 -15.384 1.00 0.00 OD2 ASP ATOM 579 67 -12.935 -24.382 -17.142 1.00 0.00 ATOM 580 C ASP 67 -14.682 -23.758 -13.950 1.00 0.00 OT1 ASP -15.660 -24.405 -14.385 ATOM 581 67 1.00 0.00 ATOM 582 OT2 ASP 67 -14.438 -23.589 -12.734 1.00 0.00 05' GUA -7.938 -40.883 10.519 1.00 ATOM 583 68 0.00 C5' GUA -7.691 -41.619 1.00 ATOM 584 68 9.338 0.00 C4' GUA -7.843 -40.734 8.099 1.00 0.00 ATOM 585 68 **ATOM** 04' GUA -9.135 -40.168 8.022 1.00 0.00 586 68 ATOM 587 C1' GUA 68 -9.076 -39.073 7.134 1.00 0.00 ATOM 588 N9 GUA -10.232 -38.179 7.356 1.00 0.00 68 ATOM 589 С8 GUA 68 -10.693 -37.6858.548 1.00 0.00 ATOM 590 N7 GUA 68 -11.792 -36.992 8.452 1.00 0.00 C5 GUA -12.076 -37.012 0.00 ATOM 591 68 7.091 1.00 592 60 GUA -13.165 -36.436 1.00 0.00 ATOM 68 6.370 06 GUA -14.144 -35.845 1.00 0.00 ATOM 593 68 6.822 ATOM 594 N1 GUA -13.042 -36.610 4.997 1.00 0.00 68 ATOM C2GUA -12.016 -37.3034.384 1.00 0.00 595 68 GUA ATOM 596 N2 68 -12.020 -37.375 3.051 1.00 0.00 N3 GUA -11.020 -37.888 ATOM 597 68 5.061 1.00 0.00 ATOM 598 C4 GUA 68 -11.104 -37.704 6.406 1.00 0.00 ATOM C3' GUA -6.874 -39.542 8.070 1.00 0.00 599 68 C2' ATOM 600 GUA 68 -7.773 -38.413 7.545 1.00 0.00 03' ATOM 601 GUA 68 -5.796 -39.876 7.206 1.00 0.00 THY ATOM 602 P 69 -4.581 -38.863 6.851 1.00 0.00 OP1 THY ATOM 603 69 -3.543 -39.628 6.130 1.00 0.00 OP2 THY -4.226 -38.109 ATOM 604 69 8.074 1.00 0.00 ATOM 605 05' THY 69 -5.258 -37.843 5.804 1.00 0.00 ATOM 606 C5' THY 69 -5.947 -38.325 4.666 1.00 0.00 **ATOM** 607 C4' THY -6.875 -37.259 4.069 0.00 69 1.00 04' THY ATOM 608 -7.966 - 36.8281.00 0.00 69 4.846 ATOM 609 C1' THY 69 -8.407 -35.595 4.323 1.00 0.00 N1 THY -9.332 -34.939 ATOM 610 69 5.284 1.00 0.00 0.00 ATOM 611 63 THY 69 -9.056 -34.976 6.629 1.00 ATOM 612 C5 THY 69 -9.877 -34.383 7.531 1.00 0.00 C7 THY -9.452 -34.459 ATOM 613 69 8.986 1.00 0.00 **ATOM** C4 THY 69 -11.094 -33.711 7.118 1.00 0.00 614 ATOM 615 04 THY 69 -11.885 -33.136 7.861 1.00 0.00 ATOM 616 N3 THY 69 -11.328 -33.760 5.755 1.00 0.00 C2THY ATOM 617 69 -10.497 -34.3374.806 1.00 0.00 02 THY -10.804 -34.305 1.00 0.00 ATOM 618 69 3.617 C3' THY -6.149 -35.976 ATOM 619 69 3.655 1.00 0.00 ATOM 620 C2' THY 69 -7.070 -34.875 4.200 1.00 0.00 ATOM 03' THY -5.976 -35.941 2.250 621 69 1.00 0.00 P THY ATOM 622 70 -5.154 -34.747 1.550 1.00 0.00 ATOM 623 OP1 THY 70 -4.351 -34.094 2.600 1.00 0.00ATOM 624 OP2 THY 70 -4.471 -35.273 0.344 1.00 0.00

	637								638
ATOM	625	05'	THY	70	-6.299	-33.721	1.103	1.00	0.00
ATOM	626	C5'	THY	70	-7.298	-34.082	0.172	1.00	0.00
ATOM	627	C4'	THY	70	-8.429	-33.057	0.251	1.00	0.00
ATOM	628	04'	THY	70	-8.903	-32.981	1.578	1.00	0.00
ATOM	629	C1'	THY	70	-9.627	-31.780	1.698	1.00	0.00
ATOM	630	N1	THY	70	-9.815	-31.402	3.121	1.00	0.00
ATOM	631	C6	THY	70	-8.777	-31.527	4.011	1.00	0.00
ATOM	632	C5	THY	70		-31.226	5.323	1.00	0.00
ATOM	633	C7	THY	70	-7.726	-31.420	6.204	1.00	0.00
ATOM	634	C4	THY	70	-10.211	-30.753	5.840	1.00	0.00
ATOM	635	04	THY	70	-10.449		7.007	1.00	0.00
ATOM	636	N3	THY	70	-11.205		4.882	1.00	0.00
ATOM	637	C2	THY	70	-11.056		3.528	1.00	0.00
ATOM	638	02	THY	70	-11.974		2.748	1.00	0.00
ATOM	639	C3'	THY	70		-31.623	-0.080	1.00	0.00
ATOM	640	C2'	THY	70		-30.781	0.971	1.00	0.00
ATOM	641	03'	THY	70		-31.317	-1.421	1.00	0.00
ATOM	642	P	ADE	71		-29.854	-2.056	1.00	0.00
ATOM	643		ADE	71		-29.940	-3.530	1.00	0.00
ATOM	644		ADE	71		-29.169	-1.382	1.00	0.00
ATOM	645	05'	ADE	71		-29.078	-1.561	1.00	0.00
ATOM	646	C5'	ADE	71	-10.698		-2.066	1.00	0.00
ATOM	647	C4'	ADE	71	-11.530		-1.406	1.00	0.00
ATOM	648	04'	ADE	71	-11.767		-0.023	1.00	0.00
ATOM	649	C1'	ADE	71	-11.503		0.749	1.00	0.00
ATOM	650	N9	ADE	71		-27.493	2.184	1.00	0.00
ATOM	651	C8	ADE	71		-27.939	2.724	1.00	0.00
ATOM	652	N7	ADE	71		-27.914	4.019	1.00	0.00
ATOM	653	C5	ADE	71	-11.165		4.379	1.00	0.00
ATOM	654	C6	ADE	71		-27.058	5.632	1.00	0.00
ATOM	655	N6	ADE	71		-27.252	6.749	1.00	0.00
ATOM	656	N1	ADE	71	-12.911		5.687	1.00	0.00
ATOM	657	C2	ADE	71		-26.226	4.543	1.00	0.00
ATOM	658	N3	ADE	7,1		-26.495	3.299	1.00	0.00
ATOM	659	C4	ADE	71		-27.094	3.280	1.00	0.00
ATOM	660	C3'	ADE	71		-26.825	-1.419	1.00	0.00
ATOM	661	C2'	ADE	71		-26.796	0.037	1.00	0.00
ATOM	662	03'	ADE	71		-25.672	-1.761	1.00	0.00
ATOM	663	P	GUA	72		-24.280	-2.021	1.00	0.00
ATOM	664	0P1	GUA	72		-24.396	-1.459	1.00	0.00
ATOM	665		GUA	72		-23.893	-3.435	1.00	0.00
ATOM	666	05'	GUA	72		-23.301	-1.098	1.00	0.00
ATOM	667	C5'	GUA	72		-23.083	-1.395	1.00	0.00
ATOM	668	C4'	GUA	72		-22.549	-0.178	1.00	0.00
ATOM	669	04'	GUA	72		-23.337	0.959	1.00	0.00
ATOM	670	C1'	GUA	72		-22.517	1.992	1.00	0.00
ATOM	671	N9	GUA	72		-23.218	2.742	1.00	0.00
ATOM	672	C8	GUA			-23.718	2.258	1.00	0.00
ATOM	673	N7	GUA			-24.166	3.175	1.00	0.00
ATOM	674	C5	GUA	72	-10.470	-23.968	4.356	1.00	0.00

639 640 ATOM 675 C6 GUA 72 -10.090 -24.238 5.702 1.00 0.00 ATOM 676 06 **GUA** 72 -9.027 -24.704 6.102 1.00 0.00 ATOM 677 N1 GUA 72 -11.090 -23.921 6.617 1.00 0.00 ATOM 678 C2 **GUA** 72 -12.328 -23.419 6.271 1.00 0.00 N2 **GUA** 72 -13.189 -23.181 7.262 1.00 0.00 ATOM 679 ATOM 680 N3 **GUA** 72 -12.676 -23.128 5.009 1.00 0.00 **C4 GUA** 72 -11.707 -23.425 4.100 1.00 0.00 ATOM 681 ATOM 682 C3' GUA 72 -13.312 -21.099 0.178 1.00 0.00 683 C2' **GUA** 72 -12.249 -21.312 1.251 1.00 0.00 ATOM ATOM 684 03' GUA 72 -14.483 - 20.4720.667 1.00 0.00 ATOM 685 P **GUA** 73 -14.506 -18.945 1.180 1.00 0.00 ATOM 686 OP1 GUA 73 -13.216 -18.3050.837 1.00 0.00 OP2 GUA -15.777 -18.327 0.743 1.00 0.00 ATOM 687 73 05' GUA ATOM 688 73 -14.560 -19.148 2.775 1.00 0.00 C5' GUA 73 -15.687 -19.742 3.393 1.00 0.00 ATOM 689 ATOM 690 C4' GUA 73 -15.554 -19.692 4.916 1.00 0.00 GUA 04' -14.406 -20.413 5.327 1.00 0.00 ATOM 691 73 C1' 692 GUA 73 -13.674 -19.6536.265 1.00 0.00 ATOM N9 GUA 693 73 -12.248 -20.042 6.203 1.00 0.00 ATOM ATOM C8 GUA 73 -11.452 -20.147 5.093 1.00 0.00 694 GUA 0.00 ATOM 695 N7 73 -10.246 - 20.5885.330 1.00 696 C5 GUA 73 -10.232 -20.767 6.709 1.00 0.00 ATOM 63 GUA 73 -9.181 -21.216 7.564 1.00 0.00 ATOM 697 ATOM 698 06 GUA 73 -8.046 -21.558 7.234 1.00 0.00 N1 GUA 1.00 0.00 ATOM 699 73 -9.556 -21.233 8.903 ATOM 700 C2 GUA 73 -10.814 -20.891 9.364 1.00 0.00 ATOM 701 N2 GUA 73 -11.037 -20.915 10.679 1.00 0.00 N3 GUA ATOM 702 73 -11.806 - 20.4898.561 1.00 0.00 C4 GUA 1.00 ATOM 703 73 -11.451 -20.437 7.251 0.00 704 C3' GUA 73 -15.376 -18.257 5.433 1.00 0.00 ATOM C2' ATOM 705 GUA 73 -13.886 -18.227 5.769 1.00 0.00 **ATOM** 706 03' GUA 73 -16.207 -18.073 6.567 1.00 0.00 P GUA: ATOM 707 74 -16.361 -16.644 7.298 1.00 0.00 OP1 GUA -15.935 -15.580 0.00 ATOM 708 74 6.362 1.00 ATOM 709 OP2 GUA -17.702 -16.584 7.918 1.00 0.00 74 05' GUA -15.265 -16.746 1.00 0.00 ATOM 710 74 8.471 ATOM C5' GUA -15.486 -17.5679.602 1.00 0.00 711 74 C4' GUA 1.00 **ATOM** 712 74 -14.296 -17.486 10.561 0.00 **ATOM** 713 04' GUA 74 -13.130 -18.017 9.956 1.00 0.00 714 C1' GUA 74 -12.020 -17.289 10.428 1.00 0.00 ATOM ATOM 715 N9 GUA 74 -10.842 -17.494 9.554 1.00 0.00 63 GUA -10.763 -17.374 0.00 ATOM 716 74 8.191 1.00 ATOM 717 N7 GUA 74 -9.595 -17.675 7.694 1.00 0.00 ATOM 718 C5 GUA 74 -8.836 -18.011 8.810 1.00 0.00 0.00 ATOM 719 6 GUA 74 -7.481 - 18.4498.902 1.00 06 GUA -6.685 -18.639 7.985 1.00 0.00 ATOM 720 74 N1 GUA 74 -7.081 -18.670 10.215 1.00 0.00 ATOM 721 ATOM 722 C2GUA 74 -7.900 -18.516 11.315 1.00 0.00 N2 ATOM 723 GUA 74 -7.375 -18.736 12.523 1.00 0.00 ATOM N3GUA -9.179 -18.125 11.230 1.00 0.00 724 74

```
641
                                                                  642
        725 C4 GUA
ATOM
                        74
                                 -9.588 - 17.890
                                                  9.955
                                                         1.00 0.00
ATOM
        726
             C3'
                 ·GUA
                        74
                                -13.944 -16.044
                                                  10.969
                                                         1.00
                                                                0.00
        727 . C2'
                 GUA
ATOM
                        74
                                -12.561 -15.869
                                                 10.335
                                                          1.00
                                                                0.00
        728
             03'
                 GUA
ATOM
                        74
                                -13.922 -15.974
                                                 12.385
                                                         1.00
                                                                0.00
        729
             P
                 THY
ATOM
                        75
                                -13.615 -14.609
                                                 13.194
                                                         1.00
                                                                0.00
            OP1 THY
ATOM
        730
                        75
                                -14.592 -14.491
                                                 14.298
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        731
             OP2 THY
                        75
                                -13.455 -13.500
                                                 12.227
                                                         1.00
                                                                0.00
             05'
ATOM
        732
                 THY
                         75
                                -12.170 -14.933
                                                 13.827
                                                         1.00
                                                                0.00
                 THY
ATOM
        733
             C5'
                         75
                                -12.017 -15.963
                                                 14.788
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        734 C4'
                 THY
                        75
                                -10.551 -16.107
                                                 15.201
                                                          1.00
                                                                0.00
             04'
                 THY
ATOM
        735
                         75
                                 -9.760 -16.341
                                                 14.049
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        736
             C1' THY
                         75
                                 -8.602 -15.538
                                                 14.104
                                                          1.00
                                                                0.00
             N1
                 THY
ATOM
        737
                         75
                                 -8.084 -15.296
                                                  12.729
                                                          1.00
                                                                0.00
             C6
                 THY
ATOM
        738
                         75
                                 -8.913 -14.803
                                                 11.746
                                                         1.00
                                                                0.00
             C5
                 THY
ATOM
        739
                         75
                                 -8.470 -14.631
                                                  10.475
                                                         1.00
                                                                0.00
                 THY
        740
             C7
                         75
ATOM
                                 -9.459 -14.032
                                                  9.490
                                                         1.00
                                                                0.00
                 THY
ATOM
        741
             C4
                         75
                                 -7.122 -14.994
                                                  10.087
                                                          1.00
                                                                0.00
                 THY
ATOM
        742 04
                         75
                                 -6.655 -14.953
                                                  8.952
                                                         1.00
                                                                0.00
                 THY
ATOM
        743
             N3
                         75
                                 -6.344 -15.437
                                                  11.140
                                                         1.00
                                                                0.00
        744
             C2
                 THY
                         75
                                 -6.752 -15.600
                                                  12.453 1.00
ATOM
                                                                0.00
ATOM
             02
                 THY
        745
                         75
                                 -5.952 -15.990
                                                  13.300
                                                         1.00
                                                                0.00
             C3'
                 THY
                                                                0.00
ATOM
        746
                         75
                                 -9.988 -14.845
                                                  15.873 1.00
        747 C2'
                 THY
ATOM
                         75
                                 -9.116 -14.261
                                                 14.765
                                                         1.00
                                                                0.00
        748
             03'
                 THY
ATOM
                         75
                                 -9.232 -15.216
                                                 17.014
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        749
             P
                 THY
                         76
                                 -8.646 -14.125
                                                 18.053
                                                         1.00
                                                                0.00
             OP1 THY
ATOM
        750
                         76
                                 -9.007 -12.771
                                                  17.579
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        751
             OP2 THY
                         76
                                 -9.011 -14.548
                                                 19.424
                                                          1.00
                                                                0.00
             05' THY
        752
                         76
                                 -7.054 -14.298
ATOM
                                                 17.878
                                                          1.00
                                                                0.00
             C5'
                 THY
ATOM
        753
                         76
                                 -6.387 -15.446
                                                 18.369
                                                          1.00
                                                                0.00
        754
             C4'
                 THY
                                                  17.954
ATOM
                         76
                                 -4.916 -15.411
                                                          1.00
                                                                0.00
        755
             04'
                 THY
                                 -4.843 -15.287
                                                 16.543
ATOM
                         76
                                                          1.00
                                                                0.00
                 THY
ATOM
        756
             C1'
                         76
                                 -3.836 -14.372 16.184
                                                                0.00
                                                         1.00
ATOM
        757
             N1
                 THY
                         76
                                 -4.141 -13.800
                                                 14.836
                                                          1.00
                                                                0.00
             60
                 THY
ATOM
        758
                         76
                                 -5.292 -13.072 14.629
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        759
             C5
                 THY
                         76
                                 -5.603 -12.577
                                                  13.404
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        760
             C7
                 THY
                         76
                                 -6.886 -11.775
                                                 13.299
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        761
             C4
                 THY
                         76
                                 -4.759 -12.814
                                                 12.251
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        762
             04
                  THY
                         76
                                 -4.976 -12.415
                                                  11.110
                                                          1.00
                                                                0.00
             N3
                 THY
ATOM
        763
                         76
                                 -3.646 -13.589
                                                  12.521
                                                          1.00
                                                                0.00
        764
             C2
                 THY
                                                 13.760
ATOM
                         76
                                 -3.300 -14.105
                                                          1.00
                                                                0.00
        765
             02
                 THY
                         76
                                 -2.294 -14.803
                                                  13.866
ATOM
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        766
             C3'
                 THY
                         76
                                 -4.139 -14.226
                                                  18.557
                                                          1.00
                                                                0.00
             C2'
                 THY
ATOM
        767
                         76
                                 -3.898 -13.351
                                                  17.323
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        768
             03'
                 THY
                         76
                                 -2.970 -14.732
                                                 19.194
                                                          1.00
                                                                0.00
             P
                  ADE
ATOM
        769
                         77
                                 -1.788 -13.795
                                                 19.775
                                                                0.00
                                                         1.00
ATOM
        770
             OP1 ADE
                         77
                                 -1.122 -14.473
                                                  20.914
                                                         1.00
                                                                0.00
             OP2 ADE
ATOM
        771
                         77
                                 -2.276 -12.407
                                                  19.922
                                                                0.00
                                                          1.00
             05' ADE
ATOM
        772
                         77
                                 -0.768 -13.852
                                                  18.540
                                                          1.00
                                                                0.00
              C5' ADE
ATOM
        773
                         77
                                 -0.266 -15.097
                                                  18.099
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             C4' ADE
        774
                         77
                                  0.694 -14.894
                                                 16.934 1.00 0.00
```

```
643
                                                                   644
ATOM
        775 04' ADE
                         77
                                  0.021 -14.317 15.835 1.00 0.00
             C1'
                 ADE
                         77
                                  0.862 -13.378
                                                 15.200
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        776
ATOM
        777
             N9
                  ADE
                         77
                                 -0.005 -12.433
                                                 14.465
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        778
             C8
                  ADE
                         77
                                 -1.145 -11.821
                                                  14.921
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        779
             N7
                  ADE
                         77
                                 -1.851 -11.235
                                                  13.997
                                                          1.00
                                                                0.00
                                                          1.00
        780
             C5
                  ADE
                                 -1.099 -11.437
                                                 12.848
ATOM
                         77
                                                                0.00
ATOM
        781
             63
                  ADE
                         77
                                 -1.295 -11.061
                                                 11.508
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        782 N6
                  ADE
                         77
                                  -2.392 -10.411
                                                  11.119
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        783
             N1
                  ADE
                         77
                                  -0.334 -11.345
                                                  10.608
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        784
             C2
                  ADE
                         77
                                  0.752 -11.997
                                                  11.019
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        785
             N3
                  ADE
                         77
                                  1.025 -12.466
                                                 12.236
                                                          1.00
                                                                0.00
                  ADE
                                  0.052 -12.128
                                                  13.125
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        786
             C4
                         77
ATOM
        787
             C3'
                  ADE
                         77
                                  1.849 -13.950
                                                  17.273
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                          1.00
ATOM
        788
             C2'
                 ADE
                         77
                                  1.572 -12.737
                                                  16.385
                                                                 0.00
ATOM
             03'
                  ADE
                         77
                                  3.045 -14.644
                                                  16.971
                                                          1.00
                                                                 0.00
        789
                                                          1.00
ATOM
        790
             P
                  GUA
                         78
                                  4.459 -14.232
                                                  17.609
                                                                 0.00
ATOM
        791
             OP1 GUA
                         78
                                  5.407 -15.340
                                                  17.364
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OP2 GUA
                                   4.227 -13.747
                                                  18.993
ATOM
         792
                         78
                                                          1.00
                                                                 0.00
             05'
                  GUA
                                   4.869 -13.008
                                                  16.656
ATOM
         793
                         78
                                                          1.00
                                                                 0.00
         794
             C5'
                  GUA
                                  5.345 -13.260
                                                  15.346
                                                          1.00
ATOM
                         78
                                                                 0.00
ATOM
         795
             C4'
                  GUA
                                   5.308 -12.005
                                                  14.471
                                                          1.00
                         78
                                                                 0.00
         796
              04'
                  CUA
                         78
                                   3.991 -11.594
                                                  14.174
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
         797
             C1'
                  GUA
                         78
                                   4.085 -10.276
                                                  13.682
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         798
              N9
                  GUA
                         78
                                   2.747
                                         -9.644
                                                  13.596
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         799
              68
                  GUA
                         78
                                   1.823
                                         -9.460
                                                  14.594
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  GUA
ATOM
         800
             N7
                         78
                                   0.702
                                         -8.929
                                                  14.195
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         801
              C5
                  GUA
                         78
                                   0.890 - 8.738
                                                  12.831
                                                          1.00
                                                                 0.00
              C6
                  GUA
                         78
                                         -8.201
                                                  11.848
ATOM
         802
                                   0.005
                                                          1.00
                                                                 0.00
         803
              06
                  GUA
                                  -1.131
                                         -7.757
                                                  12.006
ATOM
                         78
                                                           1.00
                                                                 0.00
         804
              N1
                  GUA
                         78
                                   0.558
                                          -8.214
                                                  10.574
                                                                 0.00
ATOM
                                                           1.00
         805
              C2
                  GUA
                         78
                                   1.818
                                          -8.687
                                                  10.273
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              N2
                  GUA
                                   2.199
                                          -8.655
                                                   8.993
ATOM
         806
                         78
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         807
              N3
                  GUA
                         78
                                   2.658
                                          -9.181
                                                  11.195
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  GUA
ATOM
         808
              C4
                         78
                                   2.136
                                         -9.180
                                                  12.453
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         809
              C3'
                  GUA
                         78
                                   5.967 -10.772
                                                  15.103
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         810
              C2'
                  GUA
                         78
                                   4.993 -9.639
                                                  14.731
                                                          1.00
                                                                 0.00
              03'
ATOM
         811
                 GUA
                         78
                                   7.275 - 10.655
                                                  14.573
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         812
             P
                  GUA
                         79
                                   8.262
                                          -9.443
                                                  14.952
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         813
              OP1 GUA
                                   9.647
                                          -9.904
                                                  14.703
                                                           1.00
                         79
                                                                 0.00
              OP2 GUA
ATOM
         814
                         79
                                   7.875
                                          -8.929
                                                   16.286
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         815
              05' GUA
                          79
                                   7.874
                                          -8.376
                                                   13.819
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C5'
                  GUA
                                   8.070
                                          -8.675
ATOM
         816
                          79
                                                   12.447
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C4'
                  GUA
                                   7.360
                                          -7.649
                                                   11.565
                                                                 0.00
ATOM
         817
                          79
                                                           1.00
              04'
                  GUA
                                   5.979
                                          -7.601
                                                  11.868
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         818
                          79
              C1'
                  GUA
                                          -6.317
                                                  11.536
                                                                 0.00
ATOM
         819
                          79
                                   5.499
                                                           1.00
ATOM
         820
              N9
                  GUA
                          79
                                   4.205
                                          -6.074
                                                  12.212
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              С8
                  GUA
                                          -6.241
                                                   13.541
                                                           1.00
                                                                 0.00
         821
                         79
                                   3.907
                                          -5.972
ATOM
         822
              N7
                  GUA
                          79
                                   2.673
                                                   13.854
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C5
                  GUA
                          79
                                   2.099
                                          -5.598
                                                   12.645
         823
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         824
              c_{6}
                  GUA
                                   0.762 - 5.195
                                                  12.354
                                                          1.00 0.00
```

					(021)				131771 22 (
	645								646
ATOM	825	06	GUA	79 	-0.176	-5.055	13.135	1.00	0.00
ATOM	826	N1	GUA	79	0.562	-4.958	10.999	1.00	0.00
ATOM	827	C2	GUA	79	1.541	-5.067	10.035	1.00	0.00
ATOM	828	N2	GUA	79	1.194	-4.782	8.779	1.00	0.00
ATOM	829	N3	GUA	79	2.808	-5.416	10.308	1.00	0.00
ATOM	830	C4	GUA	79	3.022	-5.675	11.627	1.00	0.00
ATOM	831	C3'	GUA	79	7.887	-6.220	11.760	1.00	0.00
ATOM	832	C2'	GUA	79	6.613	-5.435	12.091	1.00	0.00
ATOM	833	03'	GUA	79	8.526	-5.815	10.561	1.00	0.00
ATOM	834	P	GUA	80	9.252	-4.381	10.400	1.00	0.00
ATOM	835	0P1	GUA	80	9.588	-3.863	11.744	1.00	0.00
ATOM	836	0P2	GUA	80	10.306	-4.511	9.371	1.00	0.00
ATOM	837	05'	GUA	80	8.064	-3.481	9.791	1.00	0.00
ATOM	838	C5'	GUA	80	7.554	-3.736	8.497	1.00	0.00
ATOM	839	C4'	GUA	80	6.312	-2.880	8.243	1.00	0.00
ATOM	840	04'	GUA	80	5.317	-3.179	9.205	1.00	0.00
ATOM	841	C1'	GUA	80	4.612	-1.996	9.493	1.00	0.00
ATOM	842	N9	GUA	80	3.865	-2.121	10.760	1.00	0.00
ATOM	843	C8	GUA	80	4.346	-2.411	12.010	1.00	0.00
ATOM	844	N7	GUA	80	3.437	-2.438	12.942	1.00	0.00
ATOM	845	C5	GUA	80	2.258	-2.153	12.262	1.00	0.00
ATOM	846	C6	GUA	80	0.918	-2.053	12.743	1.00	0.00
ATOM	847	06	GUA	80	0.512	-2.174	13.897	1.00	0.00
ATOM	848	N1	GUA	80	0.008	-1.809	11.722	1.00	0.00
ATOM	849	C2	GUA	80	0.340	-1.653	10.393	1.00	0.00
ATOM	850	N2	GUA	80	-0.654	-1.432	9.531	1.00	0.00
ATOM	851	N3	GUA	80	1.599	-1.717	9.941	1.00	0.00
ATOM	852	C4	GUA	80	2.508	-1.976	10.921	1.00	0.00
ATOM	853	C3'	GUA	80	6.580	-1.370	8.368	1.00	0.00
ATOM	854	C2'	GUA	80	5.750	-0.982	9.588	1.00	0.00
ATOM	855	03'	GUA	80	6.109	-0.680	7.228	1.00	0.00
ATOM	856	05'	CYT	81	-9.140	0.881	13.308	1.00	0.00
ATOM	857	C5'	CYT	81	-8.720	1.617	12.177	1.00	0.00
ATOM	858	C4'	CYT	81	-7.622	0.880	11.402	1.00	0.00
ATOM	859	04'	CYT	81	-6.525	0.559	12.230	1.00	0.00
ATOM	860	C1'	CYT	81	-5.753	-0.388	11.525	1.00	0.00
ATOM	861	N1	CYT	81	-4.796	-1.083	12.421	1.00	0.00
ATOM	862	C6	CYT	81	-5.208	-1.551	13.644	1.00	0.00
ATOM	863	C5	CYT	81	-4.369	-2.218	14.468	1.00	0.00
ATOM	864	C4	CYT	81	-3.019	-2.399	14.012	1.00	0.00
ATOM	865	N4	CYT	81	-2.122	-3.027	14.772	1.00	0.00
ATOM	866	N3	CYT	81	-2.632	-1.960	12.808	1.00	0.00
ATOM	867	C2	CYT	81	-3.495	-1.313	11.977	1.00	0.00
ATOM	868	02	CYT	81	-3.116	-0.960	10.862	1.00	0.00
ATOM	869	C3'	CYT	81	-8.052	-0.469	10.808	1.00	0.00
ATOM	870	C2'	CYT	81	-6.816	-1.352	11.012	1.00	0.00
ATOM	871	03'	CYT	81	-8.410	-0.285	9.450	1.00	0.00
ATOM	872	P	CYT	82	-8.864	-1.508	8.498	1.00	0.00
ATOM	873		CYT	82	-9.285	-2.634	9.361	1.00	0.00
ATOM	874		CYT	82	-9.788	-0.975	7.475	1.00	0.00

	647				(525)				648
ATOM	875	05'	CYT	82	-7.481	-1.921	7.773	1.00	0.00
ATOM	876	C5'	CYT	82	-6.833	-1.043	6.870	1.00	0.00
ATOM	877	C4'	CYT	82	-5.539	-1.671	6.336	1.00	0.00
ATOM	878	04'	CYT	82 82	-4.661	-1.953	7.407	1.00	0.00
	879	C1'	CYT	82 82		-3.183	7.197	1.00	0.00
ATOM					-3.997				
ATOM	880	N1	CYT	82	-3.710	-3.759	8.536	1.00	0.00
ATOM	881	C6	CYT	82	-4.731	-3.857	9.443	1.00	0.00
ATOM	882	C5	CYT	82	-4.531	-4.289	10.703	1.00	0.00
ATOM	883	C4	CYT	82	-3.189	-4.652	11.056	1.00	0.00
ATOM	884	N4	CYT	82	-2.933	-5.149	12.266	1.00	0.00
ATOM	885	N3	CYT	82	-2.183	-4.542	10.173	1.00	0.00
ATOM	886	C2	CYT	82	-2.408	-4.104	8.899	1.00	0.00
ATOM	887	02	CYT	82	-1.476	-4.034	8.099	1.00	0.00
ATOM	888	C3'	CYT	82	-5.780	-2.998	5.601	1.00	0.00
ATOM	889	C2'	CYT	82	-5.030	-4.025	6.448	1.00	0.00
ATOM	890	03'	CYT	82	-5.288	-2.877	4.275	1.00	0.00
ATOM	891	P	CYT	83	-5.529	-4.012	3.150	1.00	0.00
ATOM	892		CYT	83	-5.514	-3.362	1.822	1.00	0.00
ATOM	893		CYT	83	-6.686	-4.842	3.553	1.00	0.00
ATOM	894	05'	CYT	83	-4.201	-4.910	3.285	1.00	0.00
ATOM	895	C5'	CYT	83	-2.981	-4.525	2.678	1.00	0.00
ATOM	896	C4'	CYT	83	-1.862	-5.460	3.145	1.00	0.00
ATOM	897	04'	CYT	83	-1.757	-5.396	4.553	1.00	0.00
ATOM	898	C1'	CYT	83	-1.086	-6.542	5.032	1.00	0.00
ATOM	899	N1	CYT	83	-1.675	-6.936	6.338	1.00	0.00
ATOM	900	C6	CYT	83	-3.036	-6.991	6.467	1.00	0.00
ATOM	901	C5	CYT	83	-3.630	-7.212	7.662	1.00	0.00
ATOM	902	C4	CYT	83	-2.759	-7.427	8.782	1.00	0.00
ATOM	903	N4	CYT	83	-3.268	-7.630	9.999	1.00	0.00
ATOM	904	N3	CYT	83	-1.427	-7.449	8.636	1.00	0.00
ATOM	905	C2	CYT	83	-0.848	-7.218	7.423	1.00	0.00
ATOM	906	02	CYT	83	0.373	-7.276	7.304	1.00	0.00
ATOM	907	C3'	CYT	83	-2.151	-6.937	2.864	1.00	0.00
ATOM	908	C2'	CYT	83	-1.362	-7.619	3.982	1.00	0.00
ATOM	909	03'	CYT	83	-1.721	-7.313	1.564	1.00	0.00
ATOM	910	P	THY	84	-1.905	-8.814	0.986	1.00	0.00
ATOM	911		THY	84	-1.591	-8.828	-0.462	1.00	0.00
ATOM	912		THY	84	-3.214	-9.365	1.405	1.00	0.00
ATOM	913	05'	THY	84	-0.774	-9.690	1.710	1.00	0.00
ATOM	914	C5'	THY	84	0.600	-9.483	1.444	1.00	0.00
ATOM	915	C4'	THY	84		-10.395	2.351	1.00	0.00
ATOM	916	04'	THY	84		-10.204	3.690	1.00	0.00
ATOM	917	C1'	THY	84		-11.442	4.346	1.00	0.00
ATOM	918	N1	THY	84		-11.286	5.413	1.00	0.00
ATOM	919	C6	THY	84		-10.967	5.079	1.00	0.00
ATOM	920	C5	THY	84		-10.733	6.029	1.00	0.00
ATOM	921	C7	THY	84		-10.436	5.534	1.00	0.00
ATOM	922	C4	THY	84		-10.779	7.437	1.00	0.00
ATOM	923	04	THY	84		-10.547	8.350	1.00	0.00
ATOM	924	N3	THY	84	-0.781	-11.110	7.705	1.00	0.00

	649							650
ATOM	925	C2	THY	84	0.199 -11.373	6.755	1.00	0.00
ATOM	926	02	THY	84	1.336 -11.669	7.113	1.00	0.00
ATOM	927	C3'	THY	84	1.234 -11.883	2.022	1.00	0.00
ATOM	928	C2'	THY	84	0.422 -12.387	3.218	1.00	0.00
ATOM	929	03'	THY	84	2.502 -12.504	1.881	1.00	0.00
ATOM	930	P	ADE	85	2.665 -14.055	1.456	1.00	0.00
ATOM	931	0P1	ADE	85	4.004 -14.245	0.855	1.00	0.00
ATOM	932	0P2		85	1.459 -14.470	0.707	1.00	0.00
ATOM	933	05'	ADE	85	2.656 -14.787	2.889	1.00	0.00
ATOM	934	C5'	ADE	85	3.691 -14.547	3.823	1.00	0.00
ATOM	935	C4'	ADE	85	3.282 -15.024	5.217	1.00	0.00
ATOM	936	04'	ADE	85	2.075 -14.420	5.635	1.00	0.00
ATOM	937	C1'	ADE	85	1.514 -15.238	6.634	1.00	0.00
ATOM	938	N9	ADE	85	0.090 -14.891	6.832	1.00	0.00
ATOM	939	C8		. 85	-0.866 -14.673	5.873	1.00	0.00
ATOM	940	N7	ADE	85	-2.014 -14.263	6.336	1.00	0.00
ATOM	941	C5	ADE	85	-1.814 -14.240	7.712	1.00	0.00
ATOM	942	C6	ADE	85	-2.644 -13.890	8.796	1.00	0.00
ATOM	943	N6	ADE	85	-3.895 -13.454	8.636	1.00	0.00
ATOM	944	N1	ADE	85	-2.163 -14.025	10.046	1.00	0.00
ATOM	945	C2	ADE	85	-0.920 -14.467	10.203	1.00	0.00
ATOM	946	N3	ADE	85	-0.026 -14.794	9.278	1.00	0.00
ATOM	947	C4	ADE	85	-0.545 -14.658	8.028	1.00	0.00
ATOM	948	C3'	ADE	85	3.050 -16.537	5.318	1.00	0.00
ATOM	949	C2'	ADE	85	1.678 -16.610	5.998	1.00	0.00
ATOM	950	03'	ADE	85	4.108 -17.091	6.086	1.00	0.00
ATOM	951	P	ADE	86	4.183 -18.654	6.480	1.00	0.00
ATOM	952		ADE	86	5.597 -19.008	6.738	1.00	0.00
ATOM	953		ADE	86	3.393 -19.434	5.502	1.00	0.00
ATOM	954	05'	ADE	86	3.422 -18.684	7.899	1.00	0.00
ATOM	955	C5'	ADE	86	3.928 -17.941	8.989	1.00	0.00
ATOM	956	C4'	ADE	86	3.190 -18.245	10.295	1.00	0.00
ATOM	957	04'	ADE	86	1.892 -17.681	10.239	1.00	0.00
ATOM	958	C1'	ADE	86	0.911 -18.657	10.518	1.00	0.00
ATOM	959	N9	ADE	86	-0.293 -18.333	9.719	1.00	0.00
ATOM	960	C8	ADE	86	-0.450 -18.374	8.355	1.00	0.00
ATOM	961	N7	ADE	86	-1.576 -17.881	7.922	1.00	0.00
ATOM	962	C5	ADE	86	-2.231 -17.508	9.088	1.00	0.00
ATOM	963	C6	ADE	86	-3.499 -16.946	9.332	1.00	0.00
ATOM	964	N6	ADE	86	-4.348 -16.629	8.353	1.00	0.00
ATOM	965	N1	ADE	86	-3.855 -16.704	10.605	1.00	0.00
ATOM	966	C2	ADE	86	-3.009 -17.008	11.585	1.00	0.00
ATOM	967	N3	ADE	86	-1.794 -17.536	11.489	1.00	0.00
ATOM	968	C4	ADE	86	-1.459 -17.775	10.191	1.00	0.00
ATOM	969	C3'	ADE	86	3.013 -19.742	10.587	1.00	0.00
ATOM	970	C2'	ADE	86	1.577 -19.976	10.120	1.00	0.00
ATOM	971	03'	ADE	86	3.193 -19.947	11.979	1.00	0.00
ATOM	972	P	CYT	87	3.247 -21.411	12.661	1.00	0.00
ATOM	973	0P1	CYT	87	4.038 -21.282	13.906	1.00	0.00
ATOM	974	0P2	CYT	87	3.641 -22.410	11.637	1.00	0.00

	651				, ,			652
ATOM	975	05'	CYT	87	1.702 -21.658	13.064	1.00	0.00
ATOM	976	C5'	CYT	87	1.158 -21.056	14.226	1.00	0.00
ATOM	977	C4'	CYT	87	-0.375 -21.001	14.212	1.00	0.00
ATOM	978	04'	CYT	87	-0.860 -20.455	13.004	1.00	0.00
ATOM	979	C1'	CYT	87	-2.234 -20.765	12.935	1.00	0.00
					•			
ATOM	980	N1	CYT	87	-2.755 -20.628	11.553	1.00	0.00
ATOM	981	C6	CYT	87	-2.020 -21.096	10.496	1.00	0.00
ATOM	982	C5	CYT	87	-2.451 -20.959	9.225	1.00	0.00
ATOM	983	C4	CYT	87	-3.711 -20.303	9.028	1.00	0.00
ATOM	984	N4	CYT	87	-4.145 -20.041	7.797	1.00	0.00
ATOM	985	N3	CYT	87	-4.442 -19.877	10.067	1.00	0.00
ATOM	986	C2	CYT	87	-4.005 -20.047	11.346	1.00	0.00
ATOM	987	02	CYT	87	-4.709 -19.678	12.283	1.00	0.00
ATOM	988	C3'	CYT	87	-1.094 -22.353	14.350	1.00	0.00
ATOM	989	C2'	CYT	87	-2.256 -22.226	13.361	1.00	0.00
ATOM	990	03'	CYT	87	-1.527 -22.530	15.690	1.00	0.00
ATOM	991	P	CYT	88	-2.268 -23.878	16.193	1.00	0.00
ATOM	992		CYT	88	-1.839 -24.995	15.321	1.00	0.00
ATOM	993		CYT	88	-2.084 -23.976	17.657	1.00	0.00
ATOM	994	05'	CYT	88	-3.829 -23.583	15.897	1.00	0.00
ATOM	995	C5'	CYT	88	-4.558 -22.623	16.644	1.00	0.00
ATOM	996	C4'	CYT	88	-5.923 -22.358	15.995	1.00	0.00
ATOM	997	04'	CYT	88	-5.741 -21.966	14.651	1.00	0.00
ATOM	998	C1'	CYT	88	-6.896 -22.304	13.918	1.00	0.00
ATOM	999	N1	CYT	88	-6.558 -22.444	12.483	1.00	0.00
ATOM	1000	C6	CYT	88	-5.407 -23.087	12.117	1.00	0.00
ATOM	1001	C5	CYT	88	-5.047 -23.227	10.826	1.00	0.00
ATOM	1002	C4	CYT	88	-5.951 -22.690	9.842	1.00	0.00
ATOM	1003	N4	CYT	88	-5.705 -22.806	8.538	1.00	0.00
ATOM	1004	N3	CYT	88	-7.110 -22.121	10.206	1.00	0.00
ATOM	1005	C2	CYT	88	-7.448 -21.988	11.518	1.00	0.00
ATOM	1006	02	CYT	88	-8.530 -21.499	11.825	1.00	0.00
ATOM	1007	C3'	CYT	88	-6.849 -23.585	15.946	1.00	0.00
ATOM	1008	C2'	CYT	88	-7.267 -23.669	14.481	1.00	0.00
ATOM	1009	03'	CYT	88	<b>-</b> 7.959 <b>-</b> 23.385	16.809	1.00	0.00
ATOM	1010	P	CYT	89	-9.097 -24.512	17.047	1.00	0.00
ATOM	1011		CYT	89	-9.660 -24.310	18.401	1.00	0.00
ATOM	1012		CYT	89	-8.529 -25.829	16.683	1.00	0.00
ATOM	1013	05'	CYT	89	-10.248 -24.155	15.967	1.00	0.00
ATOM	1014	C5'	CYT	89	-11.120 -23.050	16.146	1.00	0.00
ATOM	1015	C4'	CYT	89	-12.206 -23.018	15.059	1.00	0.00
ATOM	1016	04'	CYT	89	-11.617 -22.878	13.782	1.00	0.00
ATOM	1017	C1'	CYT	89	-12.341 -23.614	12.815	1.00	0.00
ATOM	1018	N1	CYT	89	-11.389 -24.060	11.768	1.00	0.00
ATOM	1019	С6	CYT	89	-10.160 -24.523	12.153	1.00	0.00
ATOM	1020	C5	CYT	89	-9.190 -24.793	11.258	1.00	0.00
ATOM	1021	C4	CYT	89	-9.512 -24.578	9.879	1.00	0.00
ATOM	1022	N4	CYT	89	-8.566 -24.716	8.955	1.00	0.00
ATOM	1023	N3	CYT	89	-10.748 -24.224	9.492	1.00	0.00
ATOM	1024	C2	CYT	89	-11.723 -23.972	10.417	1.00	0.00

```
653
                                                                   654
ATOM
       1025 02 CYT
                         89
                                -12.856 -23.667
                                                  10.050 1.00 0.00
       1026
             C3'
                 CYT
ATOM
                         89
                                -13.055 -24.300
                                                  15.012
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1027
             C2' CYT
                         89
                                -12.846 - 24.821
                                                  13.593
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1028
            03'
                 CYT
                         89
                                -14.408 -23.977
                                                  15.302
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1029
             P
                 THY
                         90
                                -15.601 -25.073
                                                  15.304
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1030
            OP1 THY
                                                  16.355
                         90
                                -16.572 -24.697
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OP2 THY
ATOM
       1031
                         90
                                -15.006 -26.428
                                                  15.302 1.00
                                                                 0.00
       1032 05' THY
ATOM
                         90
                                 -16.298 -24.836
                                                  13.867
                                                                 0.00
                                                           1.00
ATOM
       1033
             C5'
                 THY
                         90
                                 -16.916 -23.603
                                                  13.543
                                                           1.00
                                                                 0.00
       1034 C4'
                 THY
ATOM
                         90
                                 -17.384 -23.595
                                                  12.082
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1035
             04'
                 THY
                         90
                                 -16.292 -23.941
                                                  11.249
                                                                 0.00
                                                           1.00
             C1' THY
ATOM
       1036
                         90
                                 -16.677 -24.914
                                                   10.302
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1037
             N1
                 THY
                         90
                                -15.492 -25.760
                                                   9.995
                                                                 0.00
                                                           1.00
                 THY
ATOM
       1038
             С6
                         90
                                 -14.877 -26.455
                                                  11.008
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1039
             C5
                 THY
                         90
                                 -13.738 -27.153
                                                  10.798
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 THY
ATOM
       1040
             C7
                         90
                                -13.169 -27.907
                                                   11.987
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1041
             C4
                  THY
                         90
                                 -13.103 -27.180
                                                   9.502
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
       1042
            04
                         90
                                -12.047 -27.753
                                                   9.253
                                                           1.00
                                                                 0.00
                 THY
ATOM
       1043
             N3
                         90
                                 -13.783 -26.476
                                                    8.516
                                                           1.00
                                                                 0.00
       1044 C2
                 THY
                                 -14.965 -25.767
ATOM
                         90
                                                    8.701
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1045
             02
                  THY
                                 -15.496 -25.195
                                                   7.753
                         90
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1046
             C3'
                  THY
                                 -18.508 -24.600
                                                   11.786
                         90
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1047
             C2'
                 THY
                         90
                                 -17.781 -25.699
                                                   11.016
                                                           1.00
                                                                 0.00
             03'
                 THY
ATOM
       1048
                         90
                                -19.515 -23.960
                                                   11.017
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1049
              P
                  ADE
                         91
                                 -20.920 -24.676
                                                   10.652
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP1 ADE
ATOM
       1050
                         91
                                -21.901 -23.621
                                                   10.314
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
       1051
              OP2 ADE
                         91
                                -21.235 -25.659
                                                   11.712
                                                           1.00
                                                                 0.00
             05' ADE
                                                                 0.00
ATOM
       1052
                         91
                                 -20.564 - 25.484
                                                    9.305
                                                           1.00
ATOM
       1053
              C5'
                 ADE
                                 -20.396 -24.812
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         91
                                                    8.072
ATOM
       1054
             C4'
                  ADE
                         91
                                 -19.800 -25.755
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                                    7.023
ATOM
       1055
              04'
                  ADE
                         91
                                 -18.533 -26.227
                                                    7.421
                                                           1.00
                                                                 0.00
       1056
             C1'
                 ADE
                         91
                                                                 0.00
ATOM
                                 -18.249 -27.352
                                                    6.623
                                                           1.00
              N9
ATOM
       1057
                  ADE
                         91
                                 -17.151 -28.130
                                                    7.225
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1058
              68
                  ADE
                                 -17.006 -28.495
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         91
                                                    8.537
ATOM
       1059
              N7
                  ADE
                         91
                                 -15.885 -29.107
                                                    8.802
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             C5
                  ADE
                                 -15.260 -29.182
                                                           1.00
                                                                 0.00
       1060
                         91
                                                    7.559
ATOM
       1061
              6
                  ADE
                         91
                                 -14.027 -29.713
                                                    7.133
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1062
              N6
                  ADE
                         91
                                 -13.151 -30.268
                                                    7.973
                                                           1.00
                                                                  0.00
              N1
                  ADE
                                 -13.733 -29.680
ATOM
       1063
                         91
                                                    5.819
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        1064
              C2
                  ADE
                                 -14.606 -29.138
                                                    4.974
                                                           1.00
                                                                  0.00
                         91
ATOM
        1065
              N3
                  ADE
                                 -15.774 -28.571
                                                           1.00
                                                                  0.00
                         91
                                                    5.251
                  ADE
ATOM
        1066
              C4
                         91
                                 -16.046 - 28.624
                                                    6.582
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C3'
                  ADE
                                                                  0.00
ATOM
        1067
                                 -20.623 -27.027
                                                    6.762
                                                           1.00
ATOM
        1068
              C2'
                  ADE
                         91
                                 -19.556 -28.125
                                                    6.694
                                                                  0.00
                                                           1.00
              03'
        1069
                 ADE
                                 -21.354 -26.847
                                                                  0.00
ATOM
                         91
                                                    5.558
                                                           1.00
ATOM
        1070
             P
                  ADE
                         92
                                 -22.244 -28.012
                                                    4.878
                                                           1.00
                                                                  0.00
              OP1 ADE
ATOM
        1071
                          92
                                 -23.278 -27.371
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                                    4.036
ATOM
        1072
              OP2 ADE
                          92
                                 -22.640 -28.982
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                                    5.924
ATOM
        1073
              05' ADE
                          92
                                 -21.182 -28.732
                                                    3.900
                                                           1.00
                                                                  0.00
             C5' ADE
ATOM
        1074
                          92
                                 -20.565 -28.020
                                                    2.843
                                                          1.00 0.00
```

```
(329)
                                                               特開2003-135087
       655
                                                                  656
ATOM
       1075 C4' ADE
                        92
                                -19.510 -28.887
                                                  2.150 1.00 0.00
                                                         1.00 · 0.00
ATOM
       1076
             04
                 ADE
                         92
                                -18.516 -29.286
                                                  3.081
ATOM
       1077 C1'
                 ADE
                         92
                                -18.151 -30.626
                                                  2.826
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
       1078
             N9
                 ADE
                         92
                                -17.549 - 31.221
                                                  4.041
                                                         1.00
                                                                0.00
       1079
             68
                 ADE
                         92
                                -18.080 -31.274
                                                  5.305
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
ATOM
       1080
             N7
                 ADE
                         92
                                -17.286 -31.775
                                                  6.208
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
       1081
             C5
                 ADE
                         92
                                -16.142 -32.090
                                                  5.486
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
       1082
             6
                 ADE
                         92
                                -14.906 -32.655
                                                  5.858 1.00
                                                                0.00
                                                  7.124 1.00
                                                                0.00
ATOM
       1083
             N6
                 ADE
                         92
                                -14.632 -32.975
ATOM
       1084
             N1
                 ADE
                         92
                                -13.974 - 32.860
                                                   4.910
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
       1085
             C2
                 ADE
                         92
                                -14.260 -32.522
                                                  3.655
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
       1086
             N3
                 ADE
                         92
                                -15.376 -31.977
                                                  3.176
                                                          1.00
                                                                0.00
                                -16.294 -31.775
                                                          1.00
                                                                0.00
             C4
                 ADE
                         92
                                                  4.159
ATOM
       1087
             C3'
                 ADE
                                -20.091 -30.181
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1088
                         92
                                                   1.558
             C2' ADE
                         92
                                -19.508 -31.242
                                                  2.493
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1089
             03' ADE
                                -19.640 -30.307
ATOM
       1090
                         92
                                                  0.219
                                                          1.00
                                                                0.00
             P
                                -20.166 -31.471
                                                  -0.768
                                                                0.00
ATOM
       1091
                 CYT
                         93
                                                          1.00
             OP1 CYT
                                -21.289 -32.183
                                                  -0.119
ATOM
       1092
                         93
                                                          1.00
                                                                0.00
       1093
             OP2 CYT
                         93
                                -20.341 -30.892
                                                  -2.119
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             05' CYT
ATOM
       1094
                         93
                                -18.905 -32.468
                                                  -0.809
                                                          1.00
                                                                0.00
             C5' CYT
ATOM
       1095
                                -17.739 -32.143
                                                 -1.541
                                                          1.00
                                                                0.00
                         93
             C4' CYT
                                -16.673 -33.215
ATOM
       1096
                         93
                                                 -1.304
                                                          1.00
                                                                0.00
             04' CYT
                                -16.418 -33.305
                                                   0.079
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1097
                         93
ATOM
       1098
             C1' CYT
                         93
                                -15.987 -34.607
                                                   0.391
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             N1
                  CYT
                                -16.265 -34.868
                                                   1.825
                                                          1.00
                                                                0.00
       1099
                         93
ATOM
       1100
              60
                 CYT
                         93
                                -17.472 -34.501
                                                   2.366
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1101
             C5 CYT
                         93
                                -17.743 -34.668
                                                   3.679 1.00
                                                                0.00
                                -16.703 -35.241
ATOM
       1102
             C4
                CYT
                         93
                                                   4.485
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
       1103
             N4
                  CYT
                                -16.848 -35.347
                                                   5.807
                                                          1.00
                                                                0.00
                         93
ATOM
        1104
              N3
                 CYT
                         93
                                -15.536 -35.620
                                                   3.947
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        1105
             C2 CYT
                         93
                                -15.286 -35.457
                                                   2.619
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        1106
             02 CYT
                         93
                                -14.209 -35.821
                                                   2.150
                                                          1.00
                                                                0.00
       1107
             C3' CYT
                                -17.128 -34.622
                                                  -1.722
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
                         93
       1108 C2' CYT
                         93
                                -16.850 -35.498
                                                  -0.502
                                                                0.00
ATOM
                                                         1.00
ATOM
       1109 03' CYT
                         93
                                -16.393 -35.081 -2.837 1.00 0.00
END
HEADER 000000
REMARK
              0.00533
                        1.66306
                                  0.02523
                                             0.01744
                                                       2.58257
                                                                 1.96952
 0.00000
REMARK
              2.50596
                        0.25523
                                  0.53083
                                             1.04364
                                                       0.67627
 REMARK
              0.01076
                        0.00408
                                  0.00685
                                             0.02014
                                                       0.00806
                                                                        0
 REMARK
                  122
                            120
                                         1
                                                   1
                                                             0
       0
                            305
                                                 273
 REMARK
                 1378
                                       460
                                                           340
```

0.03632

REMARK

0.03615

0.20902

0.20902

0.07393

0.03559

658

657

REMARK

0.00000 0.00000

0 REMARK 0 0 0 0 0 0 ATOM 1 N GLU 5.704 -33.002 27.307 1.00 0.00 1 ATOM 2 CA GLU 4.502 -32.835 26.470 1.00 1 0.00 CB GLU ATOM 3 1 3.204 -32.967 27.292 1.00 0.00 ATOM CG GLU 2.903 -31.793 28.238 4 1 1.00 0.00 GLU ATOM CD 3.938 -31.652 29.346 5 1 1.00 0.00 OE1 GLU 3.682 -32.182 30.446 ATOM 6 1 1.00 0.00 OE2 GLU ATOM 7 5.003 -31.074 29.039 1 1.00 0.00 C ATOM 8 GLU 1 4.571 -31.518 25.695 1.00 0.00 ATOM 0 GLU 9 5.510 -30.744 25.876 1.00 1 0.00 ATOM 10 N LYS 2 3.581 -31.258 24.834 1.00 0.00 2 ATOM 11 CA LYS 3.506 -30.045 24.030 1.00 0.00 ATOM 12 CBLYS 2 2.727 -30.334 22.736 1.00 0.00 ATOM CG LYS 2 3.267 -31.519 21.921 13 1.00 0.00 ATOM 14 CD LYS 2 4.722 -31.328 21.471 1.00 0.00 ATOM CE LYS 2 5.145 -32.489 20.561 15 1.00 0.00 ATOM 16 NZ LYS 2 6.541 - 32.35120.104 1.000.00 ATOM 17 C LYS 2 2.859 -28.928 24.857 1.00 0.00 ATOM 18 0 LYS 2 1.795 -28.422 24.505 1.00 0.00 ATOM 19 N HIS 3 3.508 -28.553 25.966 1.00 0.00 ATOM 20 CA HIS 3 3.034 -27.521 26.880 1.00 0.00 ATOM CB HIS 3 3.890 -27.498 28.159 1.00 21 0.00 ATOM 22 CGHIS 3 5.386 -27.552 27.945 1.00 0.00 ATOM 23 ND1 HIS 3 6.098 -28.735 28.061 1.00 0.00 ATOM 24 CE1 HIS 3 7.388 -28.457 27.815 1.00 0.00 NE2 HIS 7.594 -27.167 ATOM 25 3 27.544 1.00 0.00 CD2 HIS 6.326 -26.598 27.630 ATOM 26 3 1.00 0.00 C 2.962 -26.155 26.191 ATOM 27 HIS 3 1.00 0.00 ATOM 0 HIS 3 3.963 -25.452 26.093 1.00 28 0.00 ATOM N ARG 1.762 -25.783 25.723 1.00 0.00 ATOM 30 CA ARG 4 1.476 -24.524 25.049 1.00 0.00 CBARG 1.427 -23.397 26.092 ATOM 31 1.00 0.00ATOM 32 CG ARG 0.754 - 22.13025.546 1.00 0.00 CD ARG ATOM 33 0.976 - 20.95826.505 1.00 0.00 ATOM NE ARG 0.361 -21.200 27.818 1.00 0.00 34 CZARG 0.578 -20.457 28.916 ATOM 35 1.00 0.00 **ATOM** 36 NH1 ARG 1.390 -19.392 28.866 1.00 0.00 NH2 ARG -0.021 -20.784 ATOM 37 4 30.068 1.00 0.00 ATOM C 2.484 -24.264 23.926 38 ARG 4 1.00 0.00 **ATOM** 39 0 ARG 3.186 -23.253 23.930 1.00 4 0.00 ATOM 40 N ALA 5 2.558 -25.181 22.956 1.00 0.00 ATOM 41 CA ALA 5 3.480 -25.083 21.830 1.00 0.00 ATOM 42 CBALA 5 3.704 - 26.48821.256 1.00 0.00 ATOM C 3.000 -24.091 20.759 43 ALA 5 1.00 0.00 ATOM 0 3.001 -24.418 19.573 44 ALA 5 1.00 0.00 ATOM 45 N ARG 6 2.612 -22.875 21.167 1.00 0.00  $\mathsf{C}\mathsf{A}$ ATOM 46 ARG 2.165 -21.819 20.269 1.00 0.00

	659								660
ATOM	47	CB	ARG	6	1.087	-20.947	20.934	1.00	0.00
ATOM	48	CG	ARG	6	-0.308	-21.562	20.778	1.00	0.00
ATOM	49	CD	ARG	6		-21.305	19.375	1.00	0.00
ATOM	50	NE	ARG	6	-2.128	-22.051	19.156	1.00	0.00
ATOM	51	CZ	ARG	6	-3.319	-21.820	19.726	1.00	0.00
ATOM	52		ARG	6		-22.722	19.531	1.00	0.00
ATOM	53		ARG	6		-20.726	20.462	1.00	0.00
ATOM	54	C	ARG	6		-20.991	19.881	1.00	0.00
ATOM	55	0	ARG	6		-20.321	20.725	1.00	0.00
ATOM	56	N	LYS	7		-21.064	18.602	1.00	0.00
ATOM	57	CA	LYS	7		-20.380	18.032	1.00	0.00
ATOM	58	СВ	LYS	7		-21.090	18.471	1.00	0.00
ATOM	59	CG	LYS	7		-22.618	18.265	1.00	0.00
ATOM	60	CD	LYS	7		-23.283	18.884	1.00	0.00
ATOM	61	CE	LYS	7		-24.815	18.864	1.00	0.00
ATOM	62	NZ	LYS	7		-25.371	17.497	1.00	0.00
ATOM	63	C	LYS	7		-20.393	16.516	1.00	0.00
ATOM	64	0	LYS	7		-21.464	15.941	1.00	0.00
ATOM	65	N	ARG	8		-19.231	15.861	1.00	0.00
ATOM	66	CA	ARG	8		-19.171	14.414	1.00	0.00
ATOM	67	CB	ARG	8		-17.755	13.964	1.00	0.00
ATOM	68	CG	ARG	8		-17.480	14.336	1.00	0.00
ATOM	69	CD	ARG	8		-18.107	13.332	1.00	0.00
ATOM	70	NE	ARG	8		-18.437	14.001	1.00	0.00
ATOM	71	CZ	ARG	8		-18.216	13.504	1.00	0.00
ATOM	72		ARG	8		-18.393	14.270	1.00	0.00
ATOM	73		ARG	8		-17.820	12.239	1.00	0.00
ATOM	74	C	ARG	8		-19.642	13.748	1.00	0.00
ATOM	75	0	ARG	8		-18.941		1.00	0.00
ATOM	76	N	GLN	9		-20.837	13.158	1.00	0.00
ATOM	77	CA	GLN	9		-21.409	12.482	1.00	0.00
ATOM	78	CB	GLN	9		-22.936	12.607	1.00	0.00
ATOM	79	CG	GLN	9		-23.339	14.072	1.00	0.00
ATOM	80	CD	GLN	9		-24.829	14.282	1.00	0.00
ATOM	81		GLN			-25.230	14.998	1.00	0.00
ATOM	82		GLN			-25.662	13.691	1.00	0.00
ATOM	83	C	GLN			-20.932	11.040	1.00	0.00
ATOM	84	0	GLN			-21.612	10.188	1.00	0.00
ATOM	85	N	ALA			-19.770	10.764	1.00	0.00
ATOM	86	CA	ALA			-19.225	9.413	1.00	0.00
ATOM	87	СВ	ALA		•	-17.964	9.394	1.00	0.00
ATOM	88	C	ALA			-20.320	8.516	1.00	0.00
ATOM	89	0	ALA			-20.975	8.899	1.00	0.00
ATOM	90	N	TRP			-20.558	7.354	1.00	0.00
ATOM	91	CA	TRP			-21.632	6.481	1.00	0.00
ATOM	92	СВ	TRP			-21.923	5.413	1.00	0.00
ATOM	93	CG	TRP			-22.504	5.901	1.00	0.00
ATOM	94		TRP			-22.000	6.859	1.00	0.00
ATOM	95		TRP			-22.817	7.033	1.00	0.00
ATOM	96		TRP			-23.898	6.181	1.00	0.00
				-			· <del>-</del>		•

					(332)			付用るし	103-1
	661							662	
ATOM	97	CZ2	TRP	11	2.977 -24.987	5.965	1.00	0.00	
ATOM	98	CH2	TRP	11	3.318 -25.938	4.996	1.00	0.00	
ATOM	99	CZ3	TRP	11	4.500 -25.795	4.252	1.00	0.00	
ATOM	100	CE3	TRP	11	5.352 -24.700	4.474	1.00	0.00	
ATOM	101	CD2	TRP	11	5.045 -23.723	5.445	1.00	0.00	
ATOM	102	C	TRP	11	9.433 -21.359	5.904	1.00	0.00	
ATOM	103	0	TRP	11	9.750 -20.236	5.516	1.00	0.00	
ATOM	104	N	LEU	12	10.256 -22.409	5.885	1.00	0.00	
ATOM	105	CA	LEU	12	11.635 -22.372		1.00	0.00	
ATOM	106		LEU	12	12.457 -23.438				
ATOM	107		LEU	12	13.003 -23.018			0.00	
ATOM	108		LEU	12	14.150 -22.007		1.00	0.00	
ATOM	109		LEU	12	11.918 -22.466		1.00		
ATOM	110	С	LEU	12	11.710 -22.610		1.00		
ATOM	111	0	LEU	12	10.786 -23.162		1.00		
ATOM	112	N	TRP	13	12.841 -22.205		1.00		
ATOM	113	CA	TRP	13	13.134 -22.363		1.00		
ATOM	114	СВ	TRP	13	14.641 -22.204		1.00		
ATOM	115	CG	TRP	13	15.551 -23.325		1.00		
ATOM	116		TRP	13	15.554 -23.786		1.00		
ATOM	117		TRP	13	16.444 -24.808		1.00		
ATOM _			TRP	13	17.066 -25.103		1.00		
ATOM	119		TRP	13	18.016 -26.074		1.00		
ATOM	120		TRP	13	18.430 -26.170		1.00		
ATOM	121		TRP	13	17.897 -25.289		1.00		
ATOM	122		TRP	13	16.962 -24.299		1.00		
ATOM	123		TRP	13	16.511 -24.181		1.00		
ATOM	124	C	TRP	13	12.729 -23.732		1.00		
ATOM	125	0	TRP	13	12.091 -23.796		1.00		
ATOM	126	N	GLU	14	13.143 -24.801		1.00		
ATOM	127	CA	GLU	14	12.957 -26.170		1.00		
ATOM	128	CB	GLU	14	14.138 -27.066		1.00		
ATOM	129	CG	GLU	. 14	14.255 -28.318				
ATOM	130		GLU	14	14.840 -29.503		1.00		
ATOM	131		GLU	14	14.136 -30.536		1.00		
ATOM	132		GLU	14	15.979 -29.347		1.00		
ATOM	133	C	GLU	14	11.541 -26.655		1.00		
ATOM	134	0	GLU	14	11.083 -27.582		1.00		
ATOM	135	N	GLU	15	10.811 -26.013		1.00		
ATOM	136	CA	GLU	15	9.418 -26.372		1.00		
ATOM	137	СВ	GLU	15	8.861 -25.819		1.00		
ATOM	138	CG	GLU	15	9.529 -26.443		1.00		
ATOM	139	CD	GLU	15	8.840 -25.967		1.00		
ATOM	140		GLU	15	9.085 -24.797		1.00		
ATOM	141		GLU	15	8.047 -26.750		1.00		
ATOM	142	C	GLU	15	8.677 -25.843		1.00		
ATOM	143	0	GLU	15	7.951 -26.588		1.00		
ATOM	144	N	ASP	16	8.898 -24.570		1.00		
ATOM	145	CA	ASP	16	8.314 -23.965		1.00		
ATOM	146	СВ	ASP	16	8.794 -22.510		1.00		
					2			3.00	

```
664
       663
                                                         1.00 0.00
ATOM
        147
             CG ASP
                         16
                                  8.089 -21.522
                                                   1.066
                                                                 0.00
             OD1 ASP
                                  7.741 -21.918
                                                   2.197
                                                          1.00
ATOM
        148
                         16
                                                                 0.00
                                  7.876 -20.375
                                                   0.611
                                                         1.00
ATOM
        149
             OD2 ASP
                         16
             C
                                  8.742 -24.775
                                                  -0.937
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        150
                  ASP
                         16
             0
                  ASP
                                  7.919 -25.116
                                                                 0.00
ATOM
        151
                         16
                                                 -1.788
                                                          1.00
ATOM
        152
             N
                  LYS
                         17
                                  10.045 -25.078 -1.012
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                  10.686 -25.830 -2.078
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        153
             CA
                 LYS
                         17
ATOM
        154
             CB
                  LYS
                         17
                                  12.180 -26.086
                                                  -1.733
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CG
                 LYS
                                  12.902 -26.611
                                                  -2.984
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        155
                         17
                                  14.202 -27.352 -2.647
ATOM
        156
             CD
                  LYS
                         17
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                                  -2.035
                                                                 0.00
ATOM
        157
             CE
                 LYS
                         17
                                  15.279 -26.453
                                                          1.00
             NZ
                  LYS
                                  15.656 -25.352
                                                  -2.941
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        158
                         17
                                   9.946 -27.158
             C
                  LYS
                                                  -2.296
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        159
                         17
             0
                  LYS
                                   9.445 -27.442
                                                  -3.384
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        160
                         17
                                   9.902 -27.973
             N
                  ASN
                                                  -1.240
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        161
                         18
                  ASN
                                   9.290 -29.289
                                                  -1.214
                                                                 0.00
ATOM
        162
             CA
                         18
                                                           1.00
              CB
                  ASN
                                   9.581 -29.978
                                                   0.120
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        163
                         18
              CG
                 ASN
                                  11.049 -30.375
                                                   0.284
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         164
                         18
ATOM
         165
              OD1 ASN
                         18
                                  11.845 -30.231
                                                  -0.643
                                                           1.00
                                                                 0.00
              ND2 ASN
                                  11.416 -30.874
                                                    1.464
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         166
                         18
ATOM
             C
                  ASN
                                   7.789 -29.227
                                                   -1.457
                                                           1.00
                                                                 0.00
         167
                         18
              0
                  ASN
                                   7.248 -30.126
                                                  -2.094
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         168
                         18
              N
                  LEU
                         19
                                   7.114 -28.184
                                                   -0.968
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         169
                                   5.683 -28.025
ATOM
         170
              CA
                 LEU
                         19
                                                  -1.160
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  LEU
                                   5.177 -26.837
                                                   -0.332
                                                                 0.00
ATOM
              CB
                         19
                                                           1.00
         171
              CG
                 LEU
                                   3.652 -26.673
                                                   -0.386
                                                                 0.00
ATOM
         172
                          19
                                                           1.00
              CD1 LEU
                                   2.953 -27.917
                                                    0.166
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         173
                          19
              CD2 LEU
                                   3.255 -25.440
                                                    0.434
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         174
                          19
ATOM
         175
              C
                  LEU
                                   5.403 -27.857
                                                   -2.652
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          19
ATOM
         176
              0
                  LEU
                          19
                                   4.580 -28.580
                                                   -3.215
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  ARG
                                   6.105 -26.916
                                                   -3.297
ATOM
         177
              N
                          20
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         178
              CA
                  ARG
                          20
                                   5.959 -26.664
                                                  -4.722
                                                           1.00
                                                                 0.00
         179
              CB
                  ARG
                                   6.835 - 25.473
                                                   -5.130
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
                          20
              CG
                  ARG
                                   6.620 -25.118
                                                  -6.606
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         180
                          20
ATOM
         181
              CD
                  ARG
                          20
                                   7.178 -23.728
                                                   -6.926
                                                           1.00
                                                                  0.00
              NE ARG
                                   6.870 -23.349
                                                   -8.312
                                                                  0.00
         182
                          20
                                                           1.00
ATOM
ATOM
         183
              CZ ARG
                          20
                                   7.138 -22.151
                                                   -8.861
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              NH1 ARG
                          20
                                   7.756 -21.200
                                                   -8.148
                                                           1.00
                                                                  0.00
         184
                                   6.785 -21.910 -10.130
ATOM
         185
              NH2 ARG
                          20
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C
                  ARG
                                   6.289 -27.932
                                                   -5.514
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         186
                          20
         187
              0
                  ARG
                          20
                                   5.546 -28.309
                                                   -6.418
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
 ATOM
         188
              N
                  SER
                          21
                                   7.393 -28.600
                                                   -5.158
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                   7.824 -29.841
                                                  -5.787
                                                                  0.00
 ATOM
         189
              CA
                  SER
                          21
                                                           1.00
              CB
                  SER
                          21
                                   9.130 -30.301
                                                   -5.130
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
         190
                                                   -5.749
                                                                  0.00
              0G
                  SER
                          21
                                   9.635 - 31.467
                                                           1.00
 ATOM
         191
 ATOM
         192
              C
                  SER
                          21
                                   6.731 -30.908
                                                   -5.655
                                                           1.00
                                                                  0.00
         193
              0
                  SER
                          21
                                   6.441 -31.637
                                                   -6.604
                                                           1.00
                                                                  0.00
 ATOM
                                                   -4.467
                   GLY
                                   6.127 -31.001
                                                                  0.00
 ATOM
         194
              N
                          22
                                                           1.00
 ATOM
         195
              CA
                  GLY
                          22
                                   5.070 -31.938 -4.143
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  GLY
                          22
                                   3.881 -31.730 -5.071 1.00 0.00
 ATOM
         196
              C
```

```
665
                                                                  666
ATOM
        197 0
                 GLY
                        22
                                  3.438 -32.673 -5.725 1.00 0.00
ATOM
        198
            N
                 VAL
                        23
                                  3.384 -30.491
                                                -5.137
                                                        1.00
                                                               0.00
        199
            CA
                 VAL
                        23
                                  2.265 -30.146
                                                 -6.002 1.00
ATOM
                                                               0.00
ATOM
        200 CB
                 VAL
                        23
                                  1.820 -28.693
                                                -5.772
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        201
            CG1 VAL
                        23
                                  0.720 -28.299
                                                -6.767
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        202 CG2 VAL
                        23
                                  1.264 -28.547 -4.350
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        203
            С
                 VAL
                        23
                                  2.636 -30.430 -7.458
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        204 0
                 VAL
                        23
                                  1.817 -30.956
                                                -8.204
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        205 N
                 ARG
                        24
                                  3.864 -30.115
                                                -7.881
                                                         1.00
                                                               0.00
        206 CA
                 ARG
ATOM
                        24
                                  4.281 -30.390 -9.248
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        207
            CB
                 ARG
                         24
                                  5.682 -29.819 -9.511
                                                         1.00
                                                               0.00
             CG
ATOM
        208
                 ARG
                         24
                                  6.089 -30.032 -10.975
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        209
             CD
                 ARG
                         24
                                  7.365 -29.256 -11.321
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        210
             NE
                 ARG
                         24
                                  7.818 -29.546 -12.691
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        211
             CZ
                 ARG
                         24
                                  7.268 -29.064 -13.821
                                                         1.00
                                                               0.00
             NH1 ARG
ATOM
        212
                         24
                                  7.773 -29.423 -15.008
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        213
             NH2 ARG
                         24
                                  6.222 -28.229 -13.771
                                                         1.00
                                                               0.00
        214 C
ATOM
                 ARG
                         24
                                  4.200 -31.892 -9.553
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        215
             0
                 ARG
                         24
                                  3.825 -32.266 -10.662
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        216
             N
                 LYS
                         25
                                  4.550 - 32.750
                                                -8.586
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        217
             CA
                 LYS
                         25
                                  4.523 -34.197 -8.775
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        218 CB
                 LYS
                         25
                                  5.482 -34.907 -7.799
                                                         1.00
                                                               0.00
                 LYS
ATOM
        219
             CG
                         25
                                  6.792 -35.350 -8.474
                                                         1.00
                                                                0.00
        220 CD
                 LYS
                         25
                                  7.758 -34.195 -8.773
ATOM
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        221
             CE
                 LYS
                         25
                                  8.810 -34.016 -7.670
                                                         1.00
                                                                0.00
                 LYS
        222 NZ
                         25
                                  8.200 -33.804
                                                 -6.347
ATOM
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        223
             C
                 LYS
                         25
                                  3.134 -34.831
                                                 -8.688
                                                         1.00
                                                                0.00
             0
                 LYS
                         25
ATOM
        224
                                  2.839 -35.723 -9.481
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        225
             N
                 TYR
                         26
                                  2.310 -34.431
                                                 -7.714
                                                         1.00
                                                                0.00
                 TYR
                                  1.010 -35.055
ATOM
        226
             CA
                         26
                                                -7.477
                                                         1.00
                                                                0.00
             CB
ATOM
        227
                 TYR
                         26
                                  1.035 -35.647
                                                 -6.063
                                                         1.00
                                                                0.00
        228
             CG TYR
ATOM
                         26
                                  2.291 -36.452
                                                -5.784
                                                               0.00
                                                         1.00
ATOM
        229
             CD1 TYR
                         26
                                  2.525 -37.651
                                                 -6.480
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        230
             CE1 TYR
                                                 -6.233
                         26
                                  3.695 -38.390
                                                         1.00
                                                               0.00
             CZ TYR
ATOM
        231
                         26
                                  4.632 -37.934
                                                 -5.290
                                                         1.00
                                                                0.00
             OH TYR
ATOM
        232
                         26
                                  5.764 -38.657
                                                 -5.057
                                                         1.00
                                                               0.00
             CE2 TYR
                                  4.399 -36.734
ATOM
        233
                         26
                                                 -4.596
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        234
             CD2 TYR
                         26
                                  3.230 -35.994
                                                 -4.844
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        235
             C
                  TYR
                                 -0.198 -34.139
                                                 -7.643
                                                         1.00
                         26
                                                                0.00
             0
ATOM
        236
                  TYR
                         26
                                 -1.292 -34.639
                                                 -7.903
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        237
             N
                  GLY
                         27
                                 -0.013 -32.828
                                                 -7.482
                                                         1.00
                                                                0.00
        238
                 GLY
ATOM
             CA
                         27
                                 -1.085 -31.842
                                                 -7.573
                                                         1.00
                                                                0.00
             C
        239
                  GLY
                                                 -6.182
ATOM
                         27
                                 -1.574 -31.439
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        240
             0
                  GLY
                         27
                                 -0.997 -31.837
                                                 -5.169
                                                         1.00
                                                                0.00
        241
             N
ATOM
                  GLU
                         28
                                 -2.660 -30.659
                                                 -6.136
                                                                0.00
                                                         1.00
ATOM
        242
             CA
                 GLU
                         28
                                 -3.292 -30.254
                                                 -4.892
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
             CB
                 GLU
        243
                         28
                                 -4.153 -28.996
                                                 -5.091
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        244
             CG
                 GLU
                         28
                                 -3.320 -27.715
                                                 -5.278
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
         245
             CD
                  GLU
                         28
                                 -2.991 -27.359
                                                 -6.726
                                                         1.00
                                                                0.00
                                                                0.00
ATOM
         246
             OE1 GLU
                         28
                                 -2.705 -26.157 -6.946
                                                         1.00
```

```
667
                                                                   668
ATOM
        247 OE2 GLU
                                 -3.035 -28.264 -7.585 1.00 0.00
                         28
             C
                 GLU
                                 -4.143 -31.436
                                                 -4.410
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        248
                         28
        249
             0
                 GLU
                         28
                                 -4.537 -32.290
                                                 -5.203
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        250
            N
                 GLY
                         29
                                 -4.421 -31.496
                                                 -3.107
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
ATOM
        251 CA
                 GLY
                         29
                                 -5.205 -32.575
                                                 -2.527
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        252 C
                 GLY
                         29
                                 -4.398 -33.868
                                                 -2.455
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        253
             0
                 GLY
                         29
                                 -4.903 -34.943
                                                 -2.772 1.00
                                                                0.00
ATOM
        254
             N
                 ASN
                         30
                                 -3.139 -33.739
                                                 -2.027
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        255
             CA
                 ASN
                         30
                                 -2.186 -34.828
                                                 -1.852
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        256
             CB
                 ASN
                         30
                                 -1.372 -35.032 -3.143
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        257
             CG
                 ASN
                         30
                                 -2.209 -35.204
                                                 -4.406
                                                          1.00
                                                                0.00
             OD1 ASN
                         30
                                 -2.263 -34.311 -5.240
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        258
ATOM
        259
             ND2 ASN
                         30
                                 -2.847 -36.357
                                                  -4.592
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             C
                  ASN
                                 -1.241 -34.429
                                                  -0.715
                                                          1.00
                                                                0.00
        260
                         30
ATOM
        261
             0
                  ASN
                         30
                                 -0.057 -34.751
                                                  -0.753 1.00
                                                                0.00
ATOM
        262
             N
                  TRP
                         31
                                 -1.734 -33.689
                                                   0.280
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        263
             CA
                 TRP
                         31
                                 -0.918 -33.164
                                                   1.366
                                                         1.00
                                                                0.00
              CB
                 TRP
ATOM
        264
                         31
                                 -1.671 -32.066
                                                   2.113 1.00
                                                                0.00
                                 -2.393 -31.160
ATOM
        265
              CG
                 TRP
                         31
                                                   1.171
                                                          1.00 0.00
              CD1 TRP
                                 -3.732 -31.057
                                                                0.00
ATOM
        266
                         31
                                                   1.046
                                                          1.00
             NE1 TRP
                                                                0.00
ATOM
         267
                         31
                                 -4.034 -30.149
                                                   0.056
                                                          1.00
ATOM
         268
             CE2 TRP
                         31
                                 -2.892 - 29.617
                                                  -0.506
                                                          1.00
                                                                0.00
              CZ2 TRP
                                 -2.673 -28.680
                                                  -1.524
ATOM
        269
                         31
                                                          1.00
                                                                0.00
             CH2 TRP
                                 -1.356 -28.350
                                                                 0.00
ATOM
         270
                         31
                                                  -1.873
                                                          1.00
              CZ3 TRP
ATOM
         271
                         31
                                 -0.279 - 28.956
                                                  -1.207
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CE3 TRP
                                  -0.510 -29.894
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         272
                         31
                                                  -0.188
              CD2 TRP
ATOM
        273
                         31
                                  -1.823 -30.247
                                                   0.191
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C
ATOM
         274
                  TRP
                         31
                                  -0.317 -34.245
                                                   2.251
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  TRP
                                  0.876 - 34.182
                                                          1.00
ATOM
         275
              0
                         31
                                                   2.527
                                                                 0.00
                                                          1.00
ATOM
         276
              N
                  SER
                         32
                                  -1.097 -35.243
                                                   2.675
                                                                 0.00
ATOM
         277
              \mathsf{CA}
                  SER
                         32
                                  -0.567 -36.338
                                                   3.484
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         278
              CB
                  SER
                         32
                                  -1.692 -37.285
                                                   3.916 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         279
              0G
                  SER
                         32-
                                  -1.153 -38.335
                                                   4.693
                                                          1.00
                                                                 0.00
              C
                  SER
ATOM
         280
                         32
                                   0.548 - 37.062
                                                   2.709
                                                          1.00
                                                                 0.00
              0
                  SER
                                   1.593 -37.395
                                                   3.269
ATOM
         281
                         32
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         282
              N
                  LYS
                         33
                                   0.338 -37.285
                                                   1.405 1.00
                                                                 0.00
              CA LYS
ATOM
         283
                         33
                                   1.305 - 37.930
                                                   0.526
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CB
                  LYS
                                   0.660 - 38.107
ATOM
         284
                         33
                                                  -0.857
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CG LYS
                         33
                                   1.521 -38.912
                                                  -1.838
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         285
ATOM
         286
              CD
                  LYS
                         33
                                   1.070 -38.701
                                                  -3.290
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         287
              CE LYS
                         33
                                  -0.369 -39.173
                                                  -3.547
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         288
              NZ LYS
                         33
                                  -0.784 -38.925
                                                  -4.942
                                                          1.00
                                                                 0.00
              C
                  LYS
ATOM
         289
                         33
                                   2.590 -37.092
                                                   0.465
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         290
              0
                  LYS
                         33
                                   3.681 -37.597
                                                   0.724
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         291
              N
                  ILE
                         34
                                   2.456 -35.806
                                                   0.128
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                   3.559 -34.858
ATOM
         292
              CA ILE
                         34
                                                   0.029
                                                          1.00
                                                                 0.00
 ATOM
              CB
                  ILE
                                   3.016 -33.488
                                                                 0.00
         293
                         34
                                                  -0.432
                                                          1.00
              CG2 ILE
 ATOM
         294
                         34
                                   4.062 -32.376
                                                  -0.301
                                                           1.00
                                                                 0.00
         295
              CG1 ILE
                                   2.574 - 33.578
                                                  -1.906
                                                                 0.00
 ATOM
                          34
                                                           1.00
 ATOM
              CD1 ILE
                                   1.713 -32.390 -2.353 1.00 0.00
         296
                          34
```

	000				(000)				101111112
A TOM	669		11.0	0.4	4 000 0	4 010	1 000		670
ATOM	297	C	ILE	34	4.322 -3		1.360	1.00	0.00
ATOM	298	0	ILE	34	5.547 -3		1.357	1.00	0.00
ATOM	299	N	LEU	35	3.602 -3		2.488	1.00	0.00
ATOM	300	CA	LEU	35	4.148 -3		3.840	1.00	0.00
ATOM	301	CB	LEU	35	2.994 -3		4.848	1.00	0.00
ATOM	302	CG	LEU	35	3.361 -3		6.326	1.00	0.00
ATOM	303	CD1		35	4.345 -3		6.861	1.00	0.00
ATOM	304		LEU	35	2.082 -3		7.168	1.00	0.00
ATOM	305	C	LEU	35	4.968 -3		4.091	1.00	0.00
ATOM	306	0	LEU	35	6.040 -3		4.690	1.00	0.00
ATOM	307	N	LEU	36	4.474 -3		3.640	1.00	0.00
ATOM	308	CA	LEU	36	5.175 -3		3.826	1.00	0.00
ATOM	309	CB	LEU	36	4.320 -3		3.306	1.00	0.00
ATOM	310	CG	LEU	36	4.945 -4	1.002	3.538	1.00	0.00
ATOM	311	CD1	LEU	36	5.040 -4	1.346	5.030	1.00	0.00
ATOM	312	CD2	LEU	36	4.090 -4	2.059	2.831	1.00	0.00
ATOM	313	C	LEU	36	6.550 -3	8.392	3.160	1.00	0.00
ATOM	314	0	LEU	36	7.550 -3	8.730	3.793	1.00	0.00
ATOM	315	N	HIS	37	6.596 -3	7.959	1.894	1.00	0.00
ATOM	316	CA	HIS	37	7.840 -3	7.847	1.144	1.00	0.00
ATOM	317	CB	HIS	37	7.538 -3	7.511	-0.323	1.00	0.00
ATOM	318	CG	HIS	37	6.667 -3	8.520	-1.024	1.00	0.00
ATOM	319	ND1	HIS	37	7.028 -3	9.849	-1.181	1.00	0.00
ATOM	320	CE1	HIS	37	6.031 -4	0.456	-1.845	1.00	0.00
ATOM	321	NE2	HIS	37	5.027 -3	9.628	-2.144	1.00	0.00
ATOM	322	CD2	HIS	37	5.436 -3	8.406	-1.622	1.00	0.00
ATOM	323	C	HIS	37	8.744 -3	6.768	1.747	1.00	0.00
ATOM	324	0	HIS	37	9.885 -3	7.040	2.116	1.00	0.00
ATOM	325	N	TYR	38	8.219 -3	5.544	1.822	1.00	0.00
ATOM	326	CA	TYR	38	8.884 -3	4.358	2.321	1.00	0.00
ATOM	327	CB	TYR	38	8.589 -3	3.198	1.371	1.00	0.00
ATOM	328	CG	TYR	38	8.960 -3	3.440	-0.083	1.00	0.00
ATOM	329	CD1	TYR	38	7.951 -3	3.564	-1.055	1.00	0.00
ATOM	330	CE1	TYR	38	8.287 -3	3.773	-2.404	1.00	0.00
ATOM	331	CZ	TYR	38	9.636 -3	3.860	-2.786	1.00	0.00
ATOM	332	OH	TYR	38	9.959 -3	34.061	-4.097	1.00	0.00
ATOM	333	CE2	TYR	38	10.647 -3	33.740	-1.817	1.00	0.00
ATOM	334	CD2	TYR	38	10.310 -3	3.531	-0.467	1.00	0.00
ATOM	335	C	TYR	38	8.372 -3	34.057	3.724	1.00	0.00
ATOM	336	0	TYR	38	7.336 -3	33.417	3.898	1.00	0.00
ATOM	337	N	LYS	39	9.104 -3	34.534	4.727	1.00	0.00
ATOM	338	CA	LYS	39	8.753 -3	34.364	6.124	1.00	0.00
ATOM	339	CB	LYS	39	9.509 -3	35.407	6.956	1.00	0.00
ATOM	340	CG	LYS	39	9.218 -3	36.820	6.426	1.00	0.00
ATOM	341	CD	LYS	39	9.776 -3	37.889	7.372	1.00	0.00
ATOM	342	CE	LYS	39	9.768 -3	39.280	6.724	1.00	0.00
ATOM	343	NZ	LYS	39	8.432 -3	39.668	6.233	1.00	0.00
ATOM	344	C	LYS	39	9.012 -3	32.925	6.578	1.00	0.00
ATOM	345	0	LYS	39	10.110 -3	32.603	7.029	1.00	0.00
ATOM	346	N	PHE	40	7.990 -3	32.068	6.458	1.00	0.00

					(331)				付用乙
	671								67.2
ATOM	347	CA	PHE	40	8.037	-30.664	6.856	1.00	0.00
ATOM	348	CB	PHE	40	6.739	-29.971	6.423	1.00	0.00
ATOM	349	CG	PHE	40	6.374	-30.080	4.955	1.00	0.00
ATOM	350	CD1	PHE	40	5.367	-30.966	4.531	1.00	0.00
ATOM	351		PHE	40	5.025	-31.049	3.171	1.00	0.00
ATOM	352	CZ	PHE	40		-30.243	2.228	1.00	0.00
ATOM	353		PHE	40		-29.362	2.650	1.00	0.00
ATOM	354		PHE	40		-29.279	4.011	1.00	0.00
ATOM	355	С	PHE	40		-30.534	8.377	1.00	0.00
ATOM	356	0	PHE	40		-31.540	9.084	1.00	0.00
ATOM	357	N	ASN	41		-29.299	8.891	1.00	0.00
ATOM	358	CA	ASN	41		-29.049	10.323	1.00	0.00
ATOM	359	СВ	ASN	41		-27.541	10.622	1.00	0.00
ATOM	360	CG	ASN	41		-26.778	10.061	1.00	0.00
ATOM	361		ASN	41		-27.362	9.513	1.00	0.00
ATOM	362		ASN	41		-25.453	10.207	1.00	0.00
ATOM	363	C	ASN	41		-29.757	11.154	1.00	0.00
ATOM	364	0	ASN	41		-30.617	11.974	1.00	0.00
ATOM	365	N	ASN	42		-29.386	10.935	1.00	0.00
ATOM	366	CA	ASN	42		-29.932	11.609	1.00	0.00
ATOM	367	CB	ASN	42		-29.745	13.138	1.00	0.00
ATOM	368	CG	ASN	42		-28.367	13.595	1.00	0.00
ATOM	369		ASN	42		-28.234	14.112	1.00	0.00
ATOM	370		ASN	42		-27.333	13.435	1.00	0.00
ATOM	371	C	ASN	42		-29.289	10.971	1.00	0.00
ATOM	372	0	ASN	42		-28.561	11.619	1.00	0.00
ATOM	373	N	ARG	43		-29.551	9.673	1.00	0.00
ATOM	374	CA	ARG	43		-29.009	8.850	1.00	0.00
ATOM	375	CB	ARG	43		-28.435	7.559	1.00	0.00
ATOM	376	CG	ARG	43		-27.701	7.748	1.00	0.00
ATOM	377	CD	ARG	43		-26.484	8.673	1.00	0.00
ATOM	378	NE	ARG	43		-25.748	8.592	1.00	0.00
ATOM	379	CZ		43		-24.532	9.107		
ATOM	380		ARG	43		-23.977		1.00	0.00
ATOM	381		ARG	43		-23.854	9.748	1.00	0.00
ATOM	382	C	ARG	43		-30.106	8.523	1.00	0.00
ATOM	383	0	ARG	43		-31.108	7.905	1.00	0.00
ATOM	384	N	THR			-29.916	8.928	1.00	0.00
ATOM	385	CA	THR			-30.860	8.665	1.00	0.00
ATOM	386	CB	THR			-30.636	9.676	1.00	0.00
ATOM	387		THR			-30.691	11.125	1.00	0.00
ATOM	388		THR			-29.390	9.421	1.00	0.00
ATOM	389	C	THR	44		-30.614	7.258	1.00	0.00
ATOM	390	0	THR			-29.642	6.612	1.00	0.00
ATOM	391	N	SER			-31.462	6.792	1.00	0.00
ATOM	392	CA	SER			-31.272	5.491	1.00	0.00
ATOM	393	CB	SER			-32.408	5.197	1.00	0.00
ATOM	394	OG	SER			-33.634	5.076	1.00	
ATOM	395	С	SER			-29.897	5.442	1.00	
ATOM	396	0	SER			-29.240	4.404	1.00	

					(338)			付開∠∪
	673							674
ATOM	397	N	VAL	46	-4.185 -29.453	6.570	1.00	0.00
ATOM	398	CA	VAL	46	-4.826 -28.150	6.684	1.00	0.00
ATOM	399	CB	VAL	46	-5.446 -27.945	8.084	1.00	0.00
ATOM	400	CG1	VAL	46	-6.105 -26.566	8.193	1.00	0.00
ATOM	401	CG2	VAL	46	-6.495 -29.005	8.427	1.00	0.00
ATOM	402	C	VAL	46	-3.780 -27.069	6.418	1.00	0.00
ATOM	403	0	VAL	46	-3.969 -26.240	5.526	1.00	0.00
ATOM	404	N	MET	47	-2.687 -27.078	7.199	1.00	0.00
ATOM	405	CA	MET	47	-1.636 -26.078	7.052	1.00	0.00
ATOM	406	CB	MET	47	-0.498 -26.268	8.069	1.00	0.00
ATOM	407	CG	MET	47	-0.941 -26.433	9.528	1.00	0.00
ATOM	408	SD	MET	47	-2.380 -25.477	10.081	1.00	0.00
ATOM	409	CE	MET	47	-2.552 -26.168	11.745	1.00	0.00
ATOM	410	C	MET	47	-1.081 -26.070	5.628	1.00	0.00
ATOM	411	0	MET	47	-0.920 -25.008	5.041	1.00	0.00
ATOM	412	N	LEU	48	-0.789 -27.247	5.073	1.00	0.00
ATOM	413	CA	LEU	48	-0.251 -27.411	3.730	1.00	0.00
ATOM	414	CB	LEU	48	0.003 -28.901	3.468	1.00	0.00
ATOM	415	CG	LEU	48	1.246 -29.375	4.237	1.00	0.00
ATOM	416		LEU	48	1.245 -30.886	4.483	1.00	0.00
ATOM	417		LEU	48	2.508 -29.028	3.446	1.00	0.00
ATOM	418	C	LEU	48	-1.162 -26.787	2.675	1.00	0.00
ATOM	419	0	LEU	48	-0.691 -25.995	1.857	1.00	0.00
ATOM	420	N	LYS	49	-2.457 -27.128	2.694	1.00	0.00
ATOM	421	CA	LYS	49	-3.416 -26.582	1.752	1.00	0.00
ATOM	422	СВ	LYS	49	-4.811 -27.185	2.003	1.00	0.00
ATOM	423	CG	LYS	49	-5.629 -27.275	0.713	1.00	0.00
ATOM	424	CD	LYS	49	-6.101 -25.933	0.139	1.00	0.00
ATOM	425	CE	LYS	49	-6.051 -26.032	-1.384	1.00	0.00
ATOM	426	NZ	LYS	49	-6.590 -24.824	-2.030	1.00	0.00
ATOM	427	C	LYS	49	-3.412 -25.059	1.867	1.00	0.00
ATOM	428	0	LYS	49	-3.187 -24.375	0.871	1.00	0.00
ATOM	429	N	ASP	50	-3.653 -24.545	3.078		
ATOM	430	CA	ASP	50	-3.674 -23.119	3.384	1.00	0.00
ATOM	431	CB	ASP	50	-3.724 -22.938	4.908	1.00	0.00
ATOM	432	CG	ASP	50	-3.433 -21.501	5.316	1.00	
ATOM	433		ASP	50	-2.264 -21.229	5.663	1.00	0.00
ATOM	434		ASP	50	-4.392 -20.703	5.298	1.00	0.00
ATOM	435	C	ASP	50	-2.454 -22.417	2.785	1.00	
ATOM	436	0	ASP	50	-2.595 -21.472	2.012	1.00	
ATOM	437	N	ARG	51	-1.262 -22.900	3.144	1.00	
ATOM	438	CA	ARG	51	0.009 -22.366	2.687	1.00	
ATOM	439	CB	ARG	51	1.160 -23.243	3.195	1.00	
ATOM	440	CG	ARG	51 <sup>1</sup>	2.396 -22.437	3.193	1.00	
ATOM	441	CD	ARG	51	2.959 -21.489	2.524	1.00	
ATOM	442	NE	ARG		4.070 -20.744	3.119	1.00	
ATOM	443	CZ	ARG	51	5.070 -20.132	2.478	1.00	
ATOM	444		ARG	51	5.248 -20.301	1.164	1.00	
ATOM	445		ARG	51	5.884 -19.341	3.181	1.00	
ATOM	446	C	ARG	51	0.050 -22.282	1.166	1.00	
AIUM	440	U	UMA	)I	0.030 -22.202	1.100	1.00	0.00

```
675
                                                                   676
                                  0.348 -21.226
                                                   0.613 1.00 0.00
ATOM
        447 0
                 ARG
                         51
ATOM
        448
             N
                 TRP
                         52
                                 -0.247 -23.390
                                                   0.477
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        449
             CA
                 TRP
                         52
                                 -0.228 -23.405
                                                  -0.972 1.00
                                                                0.00
                                                          1.00
ATOM
        450
             CB
                 TRP
                         52
                                 -0.420 -24.824
                                                  -1.499
                                                                0.00
             CG
                 TRP
                         52
                                 -0.263 -24.927
                                                  -2.983
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        451
ATOM
        452
             CD1 TRP
                         52
                                 -1.233 -25.302
                                                  -3.840
                                                          1.00
                                                                0.00
             NE1 TRP
ATOM
        453
                         52
                                 -0.753 - 25.288
                                                  -5.131
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        454
             CE2 TRP
                         52
                                  0.567 - 24.886
                                                 -5.169
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        455
             CZ2 TRP
                         52
                                  1.481 -24.706
                                                  -6.217
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        456
             CH2 TRP
                         52
                                  2.785 -24.281
                                                  -5.920
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        457
             CZ3 TRP
                         52
                                  3.159 -24.044
                                                  -4.586
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        458
             CE3 TRP
                         52
                                  2.232 -24.226
                                                  -3.543
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        459
             CD2 TRP
                         52
                                  0.911 - 24.652
                                                  -3.805
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        460
             C
                  TRP
                         52
                                 -1.258 -22.432
                                                  -1.548
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        461
             0
                  TRP
                         52
                                  -0.978 - 21.770 - 2.543
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        462
             N
                  ARG
                         53
                                  -2.440 -22.327
                                                  -0.929
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  ARG
ATOM
        463
             CA
                         53
                                 -3.485 -21.413 -1.371
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  ARG
ATOM
        464
             CB
                         53
                                  -4.740 -21.579 -0.498
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  ARG
                                                  -1.252
ATOM
        465
             CG
                         53
                                  -6.001 -21.140
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CD
                  ARG
                                  -7.270 -21.448
ATOM
        466
                         53
                                                  -0.447
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        467
             NE
                  ARG
                         53
                                 -7.607 -20.372
                                                   0.502
                                                          1.00
                                                                 0.00
        468
             CZ
                  ARG
                                  -8.712 -19.602
                                                   0.458
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         53
                                  -9.010 -18.777
             NH1 ARG
                         53
                                                                 0.00
ATOM
        469
                                                   1.467
                                                          1.00
ATOM
        470
             NH2 ARG
                         53
                                  -9.560 -19.639
                                                  -0.575
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                                 0.00
             C
                                                  -1.340
ATOM
        471
                  ARG
                         53
                                  -2.926 -19.989
                                                          1.00
ATOM
        472
             0
                  ARG
                         53
                                  -3.043 -19.252
                                                  -2.320
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         473
             N
                  THR
                         54
                                  -2.290 -19.626
                                                  -0.220
                                                           1.00
                                                                0.00
ATOM
         474
              CA
                  THR
                         54
                                  -1.654 -18.332
                                                  -0.039
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        475
              CB
                  THR
                         54
                                  -1.097 -18.219
                                                   1.385
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CG2 THR
ATOM
        476
                         54
                                  -0.503 -16.832
                                                    1.644
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OG1 THR
                                  -2.148 -18.447
                                                    2.302
                                                           1.00
ATOM
         477
                         54
                                                                 0.00
ATOM
         478
              С
                  THR
                                  -0.563 -18.146
                                                  -1.097
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         54
ATOM
         479
              0
                  THR
                                  -0.465 -17.071
                                                  -1.678
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         54
ATOM
         480
              N
                  MET
                         55
                                   0.245 - 19.183
                                                  -1.358
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         481
              CA
                  MET
                         55
                                   1.313 -19.149
                                                  -2.350
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  MET
                                   2.022 -20.519
                                                  -2.410
                                                                 0.00
ATOM
         482
              CB
                         55
                                                           1.00
ATOM
         483
              CG
                  MET
                         55
                                   3.470 - 20.453
                                                  -2.918
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  MET
                                   3.789 -19.576
                                                                 0.00
ATOM
              SD
                         55
                                                  -4.472
                                                           1.00
         484
ATOM
              CE
                  MET
                         55
                                   2.826 -20.541
                                                  -5.662
                                                           1.00
                                                                 0.00
         485
              C
                  MET
                         55
                                   0.733 - 18.742
                                                  -3.710
                                                                 0.00
ATOM
         486
                                                          1.00
ATOM
         487
              0
                  MET
                         55
                                   1.177 -17.757
                                                  -4.300
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         488
              N
                  LYS
                         56
                                  -0.264 -19.499
                                                  -4.194
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         489
              CA
                  LYS
                         56
                                  -0.931 -19.248
                                                  -5.467
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CB
                  LYS
                                  -2.091 -20.234
                                                  -5.682
                                                                 0.00
ATOM
         490
                         56
                                                           1.00
ATOM
         491
              CC
                  LYS
                          56
                                  -1.608 -21.682
                                                  -5.840
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         492
              CD
                  LYS
                          56
                                  -2.784 -22.644
                                                   -6.060
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CE
                  LYS
                                  -3.218 -22.700
                                                  -7.528
                                                                 0.00
ATOM
         493
                          56
                                                           1.00
              NZ
                  LYS
                                  -4.011 -23.910
                                                  -7.819
                                                                 0.00
 ATOM
         494
                          56
                                                           1.00
ATOM
         495
              С
                  LYS
                          56
                                  -1.426 -17.804 -5.517
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                  -1.140 -17.092 -6.472 1.00 0.00
ATOM
         496
             0
                  LYS
                          56
```

```
677
                                                                 678
ATOM
        497
            N
                 LYS
                        57
                                -2.154 -17.379 -4.481 1.00 0.00
            CA
                 LYS
ATOM
        498
                        57
                                -2.693 -16.031 -4.348
                                                       1.00
                                                              0.00
        499 CB
                LYS
ATOM
                        57
                                -3.493 -15.975 -3.033 1.00
                                                              0.00
        500 CG
                                                        1.00
ATOM
                 LYS
                        57
                                -3.876 -14.578 -2.519
                                                              0.00
        501 CD
                 LYS
ATOM
                        57
                                -2.707 -13.851
                                                -1.829
                                                       1.00
                                                              0.00
        502 CE
                 LYS
ATOM
                        57
                                -3.113 -13.249 -0.480
                                                       1.00
                                                              0.00
        503 NZ
                 LYS
ATOM
                        57
                                -2.015 -12.457
                                                 0.104 1.00 0.00
ATOM
        504
            C
                 LYS
                                -1.596 -14.959 -4.423
                        57
                                                       1.00
                                                              0.00
ATOM
        505
            0
                 LYS
                        57
                                -1.786 -13.928
                                                -5.061
                                                        1.00
                                                              0.00
ATOM
        506 N
                 LEU
                                -0.463 -15.187 -3.750
                                                        1.00
                        58
                                                              0.00
            CA
ATOM
        507
                 LEU
                        58
                                 0.648 -14.249 -3.665
                                                        1.00
                                                              0.00
ATOM
        508 CB
                 LEU
                        58
                                 1.540 -14.657 -2.476
                                                        1.00
                                                              0.00
ATOM
        509
            CG
                 LEU
                        58
                                 2.443 -13.552 -1.898
                                                        1.00
                                                              0.00
                                                              0.00
ATOM
        510 CD1 LEU
                        58
                                 3.249 -14.147 -0.736
                                                        1.00
ATOM
        511 CD2 LEU
                        58
                                 3.420 -12.954 -2.913 1.00
                                                              0.00
ATOM
        512 C
                 LEU
                        58
                                 1.423 -14.149 -4.982
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        513
            0
                 LEU
                        58
                                 1.471 -13.082 -5.591
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        514 N
                 LYS
                        59
                                 2.052 -15.246
                                                -5.417
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        515 CA
                 LYS
                        59
                                 2.867 -15.265
                                                -6.628
                                                        1.00
                                                              0.00
ATOM
        516
             CB
                 LYS
                        59
                                 3.860 -16.437
                                                -6.576
                                                        1.00
                                                              0.00
ATOM
        517
             CG
                 LYS
                        59
                                 4.781 -16.416 -5.346
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        518
             CD
                 LYS
                        59
                                 5.736 -15.214 -5.319
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        519
             CE
                 LYS
                        59
                                 6.597 -15.263 -4.050
                                                        1.00
                                                               0.00
            NZ
ATOM
        520
                 LYS
                        59
                                 7.479 -14.086 -3.940
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        521
             C
                 LYS
                        59
                                 2.052 -15.292 -7.924
                                                        1.00
                                                               0.00
        522 0
                 LYS
                                 2.625 -15.081 -8.990
ATOM
                        59
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        523 N
                 LEU
                        60
                                 0.741 -15.547 -7.847
                                                        1.00
                                                               0.00
             CA
                 LEU
ATOM
        524
                        60
                                 -0.157 -15.610 -8.992
                                                        1.00
                                                               0.00
                 LEU
                                 -0.289 -14.230 -9.664
ATOM
        525
             CB
                        60
                                                        1.00
                                                               0.00
             CG
                 LEU
ATOM
        526
                        60
                                 -1.415 -14.140 -10.709
                                                        1.00
                                                               0.00
        527
             CD1 LEU
ATOM
                        60
                                 -2.805 -14.317 -10.085
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        528
             CD2 LEU
                        60
                                 -1.346 -12.770 -11.393
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        529
             C
                 LEU
                                                               0.00
                        60
                                 0.270 -16.734 -9.934
                                                        1.00
ATOM
        530
             0
                 LEU
                                                        1.00
                                                               0.00
                        60
                                 0.708 -16.494 -11.058
                 ILE
             N
                                                        1.00
ATOM
        531
                        61
                                  0.134 - 17.974 - 9.449
                                                               0.00
        532
             CA
                 ILE
ATOM
                        61
                                  0.469 -19.189 -10.177
                                                        1.00
                                                              0.00
ATOM
             CB
                 ILE
                                  1.765 -19.815 -9.624
        533
                        61
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        534
             CG2 ILE
                        61
                                  2.110 -21.096 -10.400
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        535
             CG1 ILE
                                  2.920 -18.796
                                                -9.698
                                                        1.00
                        61
                                                               0.00
             CD1 ILE
ATOM
        536
                        61
                                  4.290 -19.377 -9.333
                                                        1.00
                                                              0.00
             C
ATOM
        537
                 ILE
                        61
                                 -0.720 -20.137 -10.044
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
             0
                 ILE
                                 -1.159 -20.419 -8.932
        538
                        61
                                                         1.00
                                                               0.00
             N
                 SER
ATOM
        539
                        62
                                 -1.240 -20.622 -11.176
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        540
             CA
                 SER
                        62
                                 -2.363 -21.550 -11.258
                                                         1.00
                                                               0.00
                                 -3.698 -20.809 -11.081
ATOM
        541
             CB
                 SER
                        62
                                                               0.00
                                                         1.00
ATOM
        542
             OG
                 SER
                        62
                                 -3.819 - 20.289 - 9.771
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
             C
                 SER
        543
                        62
                                 -2.220 -22.315 -12.580
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        544
             0
                 SER
                         62
                                 -1.133 -22.824 -12.847
                                                         1.00
                                                               0.00
                                 -3.267 -22.408 -13.407
ATOM
        545
             N
                 SER
                         63
                                                         1.00
                                                               0.00
            CA
                 SER
ATOM
         546
                         63
                                 -3.191 -23.111 -14.682 1.00 0.00
```

679 547 CB -4.583 -23.599 -15.092 1.00 0.00 ATOM SER 63 0G SER -5.083 -24.492 -14.116 1.00 63 ATOM 548 SER -2.574 -22.189 -15.736 1.00 549 C 63 ATOM SER -2.761 -20.974 -15.685 1.00 550 0 63 ATOM 551 N ASP -1.828 -22.768 -16.684 1.00 64 ATOM 552 CA ASP -1.145 -22.046 -17.749 1.00 ATOM 64 ASP -0.383 -23.041 -18.639 1.00 553 CB 64 ATOM CG- ASP 0.592 -23.895 -17.835 1.00 ATOM 554 64 OD1 ASP 0.095 -24.827 -17.164 1.00 555 64 ATOM OD2 ASP 1.804 -23.602 -17.901 1.00 ATOM 556 64 C **ASP** -2.123 -21.201 -18.567 1.00 ATOM 557 64 ATOM 0 ASP -2.020 -19.975 -18.588 1.00 558 64 SER 1.00 ATOM N 65 -3.070 -21.860 -19.243 559 **ATOM** 560 CA SER 65 -4.074 -21.204 -20.070 1.00 CB SER -4.609 -22.200 -21.105 1.00 561 65 ATOM 0G SER -3.530 -22.770 -21.821 1.00 ATOM 562 65 C SER -5.194 -20.637 -19.195 1.00 ATOM 563 65 0 SER -5.503 -19.451 -19.280 1.00 ATOM 564 65 ATOM 565 N GLU 66 -5.788 -21.496 -18.358 1.00 GLU ATOM 566 CA 66 -6.871 -21.166 -17.439 1.00 CB GLU -6.332 -20.306 -16.283 ATOM 567 66 1.00 CG GLU ATOM 568 66 -7.211 -20.417 -15.028 CD GLU -6.419 -20.079 -13.771 ATOM 569 66 OE1 GLU -5.670 -20.978 -13.328 ATOM 570 66 OE2 GLU -6.566 -18.942 -13.277 ATOM 571 66 1.00 C GLU -8.061 -20.549 -18.183 ATOM 572 66 0 GLU -8.514 -19.450 -17.864 ATOM 573 66 574 N ASP 67 -8.554 -21.282 -19.185 ATOM ATOM 575 CA ASP 67 -9.671 -20.896 -20.033 CB**ASP ATOM** 576 -9.779 -21.879 -21.208 CG ASP -8.455 -22.055 -21.945 ATOM 577 67 ATOM 578 OD1 ASP 67 -7.618 -22.823 -21.420 OD2 ASP ATOM 579 67 -8.296 -21.423 -23.012 C ASP -10.973 -20.871 -19.227 ATOM 580 67 ATOM 581 OT1 ASP 67 -11.172 -21.833 -18.452 582 OT2 ASP 67 -11.859 -20.083 -19.627 ATOM 05' GUA -7.124 -40.850 ATOM 583 68 11.024 ATOM 584 C5' GUA 68 -6.866 -41.551 9.824 C4' GUA -7.113 -40.669 8.596 1.00 0.00 ATOM 585 68 ATOM 586 04' GUA 68 -8.422 -40.134 8.595 1.00 0.00 587 C1' GUA 68 -8.447 -39.074 7.667 1.00 0.00 ATOM **GUA** ATOM 588 N9 68 -9.600 -38.184 7.911 1.00 0.00 68 GUA -9.999 -37.633 9.098 1.00 0.00 ATOM 589 68 N7 GUA -11.083 -36.914 9.018 1.00 0.00 ATOM 590 68 C5 GUA -11.415 -36.968 7.667 1.00 0.00 591 68 ATOM 0.00 **ATOM** 592 6 GUA 68 -12.494 - 36.3596.957 1.00 06 GUA -13.428 -35.699 7.412 1.00 0.00 ATOM 593 68 -12.414 -36.575 ATOM 594 N1 GUA 68 5.586 1.00 0.00 ATOM 595 C2 GUA 68 -11.434 - 37.3274.968 1.00 0.00

-11.464 -37.422

3.638 1.00 0.00

N2 GUA

596

ATOM

	601				(342)				付開2003-133
ATOU	681	NO	CIIA	co	10 440	27 020	F 606	1 00	682
ATOM	597		GUA	68		-37.936		1.00	0.00
ATOM	598		GUA	68 68		-37.714	6.976	1.00	0.00
ATOM	599		GUA	68		-39.449	8.496	1.00	0.00
ATOM	600		GUA	68		-38.371	7.967	1.00	0.00
ATOM	601		GUA	68		-39.765	7.613	1.00	0.00
ATOM	602	P	THY	69		-38.706	7.187	1.00	0.00
ATOM	603	0P1		69		-39.435	6.448	1.00	0.00
ATOM	604	0P2		69		-37.894		1.00	0.00
ATOM	605	05'		69		-37.759		1.00	0.00
ATOM	606	C5'		69		-38.320		1.00	0.00
ATOM	607		THY	69		-37.321	4.398	1.00	0.00
ATOM	608	04'	THY	69		-36.858	5.194	1.00	0.00
ATOM	609	C1'	THY	69		-35.649	4.642	1.00	0.00
ATOM	610	N1	THY	69		-34.958	5.624	1.00	0.00
ATOM	611	C6	THY	69		-34.976	6.958	1.00	0.00
ATOM	612	C5	THY	69		-34.354	7.881	1.00	0.00
ATOM	613	C7	THY	69		-34.405	9.319	1.00	0.00
ATOM	614	C4	THY	69		-33.670	7.506	1.00	0.00
ATOM	615	04	THY	69		-33.081		1.00	0.00
ATOM	616	N3	THY	69		`-33.728		1.00	0.00
ATOM	617	C2	THY	69		-34.335	5.179	1.00	0.00
ATOM	618	02	THY	69	-10.301		4.002	1.00	0.00
ATOM	619	C3,	THY	69		-36.058	3.875	1.00	0.00
ATOM	620	C2'	THY	69		-34.936	4.426	1.00	0.00
ATOM	621	03'	THY	69		-36.114	2.463	1.00	0.00
ATOM	622	P	THY	70		-35.023	1.620	1.00	0.00
ATOM	623		THY	70		-34.453	2.513	1.00	0.00
ATOM	624		THY	70		-35.627	0.339	1.00	0.00
ATOM	625		THY	70		-33.892	1.321	1.00	0.00
ATOM	626	C5'		70		-34.169	0.483	1.00	0.00
ATOM	627		THY	70		-33.071	0.585	1.00	0.00
ATOM	628		THY	70		-32.941	1.906	1.00	
ATOM	629		THY	70		-31.697	1.999	1.00	
ATOM	630	N1	THY	70		-31.317	3.419	1.00	0.00
ATOM	631	C6	THY	70		-31.545	4.314	1.00	0.00
ATOM	632	C5	THY	70		-31.280	5.632	1.00	0.00
ATOM	633	C7	THY	70		-31.619	6.511	1.00	0.00
ATOM	634	C4	THY	70		-30.726	6.152	1.00	0.00
ATOM	635	04	THY	70 70		-30.413	7.321	1.00	0.00
ATOM	636	N3	THY	70 70		-30.563	5.193	1.00	0.00
ATOM	637	C2	THY	70 70		-30.786	3.833	1.00	0.00
ATOM	638	02	THY	70 70		-30.483	3.055	1.00	0.00
ATOM	639	C3'	THY	70 70		-31.665	0.215	1.00	0.00
ATOM	640	C2'	THY	70 70		-30.763	1.274	1.00	0.00
ATOM	641	03'	THY	70 71		-31.395	-1.121	1.00	0.00
ATOM	642	P	ADE	71		-30.031	-1.885	1.00	0.00
ATOM	643		ADE	71		-29.583	-1.412	1.00	
ATOM	644		ADE	71		-30.204	-3.332	1.00	
ATOM	645		ADE	71		-29.009 -20.150	-1.307	1.00	
ATOM	646	U)	ADE	71	-10.054	-29.150	-1.560	1.00	0.00

```
683
                                                                    684
             C4' ADE
                                                          1.00 0.00
ATOM
        647
                         71
                                -10.829 - 28.066
                                                   -0.797
             04'
                 ADE
                                                           1.00
                                                                 0.00
        648
                         71
                                -10.980 -28.390
                                                   0.588
ATOM
             C1'
                                                                 0.00
        649
                 ADE
                         71
                                -10.766 -27.212
                                                    1.342
                                                           1.00
ATOM
             N9
                  ADE
                                -10.446 -27.416
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        650
                         71
                                                    2.776
             63
                  ADE
                                  -9.291 -27.916
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        651
                         71
                                                    3.319
             N7
                  ADE
                                  -9.238 -27.899
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        652
                         71
                                                    4.619
             C5
                 ADE
                                 -10.443 -27.310
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        653
                         71
                                                    4.971
ATOM
        654
             60
                  ADE
                                 -11.008 -26.984
                                                           1.00
                                                                  0.00
                         71
                                                    6.215
             N6
                  ADE
                                 -10.399 -27.287
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        655
                         71
                                                    7.362
                  ADE
ATOM
             N1
                         71
                                 -12.191 -26.342
                                                    6.243
                                                           1.00
                                                                  0.00
        656
             C2
                  ADE
ATOM
                         71
                                 -12.781 - 26.043
                                                    5.086
                                                          1.00
                                                                  0.00
        657
             N3
ATOM
        658
                  ADE
                                 -12.369 -26.322
                                                    3.851
                                                           1.00
                                                                  0.00
                         71
                  ADE
                                 -11.173 -26.972
                                                           1.00
ATOM
        659
              C4
                         71
                                                    3.859
                                                                  0.00
ATOM
        660
              C3'
                  ADE
                         71
                                 -10.060 -26.732
                                                   -0.831
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              C2'
                  ADE
                                                                  0.00
        661
                         71
                                  -9.538 - 26.714
                                                    0.603
                                                           1.00
             03'
                 ADE
                                 -10.928 -25.658
ATOM
        662
                         71
                                                   -1.111
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
             P
                  GUA
        663
                         72
                                 -10.360 -24.198
                                                   -1.470
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              OP1 GUA
                                 -10.665 -23.893
                                                   -2.882
        664
                         72
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        665
              OP2 GUA
                         72
                                  -8.961 -24.095
                                                   -0.992
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              05'
                  GUA
                                 -11.262 -23.276
                                                   -0.534
                                                                  0.00
        666
                         72
                                                           1.00
ATOM
        667
              C5'
                  GUA
                         72
                                 -12.662 -23.184
                                                   -0.710
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        668
              C4'
                  GUA
                          72
                                 -13.221 -22.297
                                                    0.403
                                                           1.00
                                                                  0.00
              04'
                  GUA
                                 -12.957 -22.922
ATOM
        669
                         72
                                                    1.651
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C1'
                  GUA
                                 -12.303 -22.022
ATOM
        670
                          72
                                                    2.519
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        671
              N9
                  GUA
                                 -11.403 -22.739
                                                    3.456
                                                           1.00
                                                                  0.00
                         72
ATOM
        672
              C8
                  GUA
                          72
                                 -10.240 -23.413
                                                    3.178
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        673
              N7
                  GUA
                          72
                                  -9.638 -23.910
                                                    4.220
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  GUA
ATOM
        674
              C5
                          72
                                 -10.465 -23.549
                                                    5.277
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        675
              60
                  GUA
                                 -10.331 -23.804
                          72
                                                    6.674
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        676
              06
                  GUA
                          72
                                  -9.406 -24.371
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                                    7.253
ATOM
        677
              N1
                  GUA
                          72
                                 -11.414 -23.333
                                                    7.407
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C2
                  GUA
                          72
ATOM
        678
                                 -12.492 -22.661
                                                    6.865
                                                           1.00
                                                                  0.00
              N2
                  GUA
ATOM
        679
                          72
                                 -13.441 -22.230
                                                    7.697
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              N3
                  GUA
        680
                          72
                                 -12.598 -22.381
                                                    5.558
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        681
              C4
                  GUA
                          72
                                 -11.562 -22.856
                                                    4.818
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        682
              C3'
                  GUA
                          72
                                 -12.508 -20.938
                                                    0.422 1.00
                                                                  0.00
              C2'
                 GUA
ATOM
        683
                          72
                                 -11.511 -21.142
                                                    1.559
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        684
              03'
                  GUA
                          72
                                 -13.435 -19.903
                                                    0.675
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        685
              P
                  GUA
                          73
                                 -13.013 -18.344
                                                    0.738
                                                           1.00
                                                                  0.00
              OP1 GUA
ATOM
        686
                          73
                                 -13.928 -17.576
                                                   -0.133
                                                           1.00
                                                                  0.00
              OP2 GUA
ATOM
         687
                          73
                                 -11.544 -18.225
                                                    0.557
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              05'
                  GUA
                                 -13.362 -18.019
         688
                          73
                                                    2.272
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C5'
                  GUA
ATOM
        689
                          73
                                 -14.694 -18.122
                                                                  0.00
                                                    2.744
                                                           1.00
ATOM
        690
              C4'
                  GUA
                          73
                                 -14.746 -18.025
                                                    4.270
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  GUA
         691
              04'
                          73
                                 -13.855 -18.976
                                                                  0.00
ATOM
                                                    4.833 1.00
ATOM
         692
              C1'
                  GUA
                          73
                                 -13.015 -18.339
                                                    5.773
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         693
              N9
                  GUA
                                 -11.712 -19.031
                                                                  0.00
                          73
                                                    5.859
                                                           1.00
              63
                  GUA
                                 -10.795 -19.263
ATOM
         694
                          73
                                                     4.868
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         695
              N7
                  GUA
                          73
                                  -9.746 - 19.937
                                                    5.247
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
              C5
                  GUA
                          73
                                  -9.978 -20.162
         696
                                                    6.599
                                                           1.00 0.00
```

					(344)			171H1 Z U
	685							686
ATOM	697	C6	GUA	73	-9.187 -20.848	7.565	1.00	0.00
ATOM	698	06	GUA	73	-8.099 -21.392	7.398	1.00	0.00
ATOM	699	N1	GUA	73	-9.788 -20.874	8.820	1.00	0.00
ATOM	700	C2	GUA	73	-11.005 -20.294	9.118	1.00	0.00
ATOM	701	N2	GUA	73	-11.439 -20.345	10.378	1.00	0.00
ATOM	702	N3	GUA	73	-11.740 -19.634	8.217	1.00	0.00
ATOM	703	C4	GUA	73	-11.177 -19.608	6.982	1.00	0.00
ATOM	704	C3'	GUA	73	-14.320 -16.655	4.816	1.00	0.00
ATOM	705	C2'	GUA	73	-12.871 -16.932	5.206	1.00	0.00
ATOM	706	03'	GUA	73	-15.151 -16.361	5.926	1.00	0.00
ATOM	707	P	GUA	74	-15.023 -15.007	6.792	1.00	0.00
ATOM	708		GUA	74	-16.383 -14.461	6.998	1.00	0.00
ATOM	709		GUA	74	-13.971 -14.153	6.199	1.00	0.00
ATOM	710	05'	GUA	74	-14.482 -15.572	8.199	1.00	0.00
ATOM	711	C5'	GUA	74	-15.278 -16.440	8.988	1.00	0.00
ATOM	712	C4'	GUA	74	-14.597 -16.767	10.321	1.00	0.00
ATOM	713	04'	GUA	74	-13.358 -17.417	10.087	1.00	0.00
ATOM	714	C1'	GUA	74	-12.302 -16.745	10.744	1.00	0.00
ATOM	715	N9	GUA	74	-11.092 -16.831	9.894	1.00	0.00
ATOM	716	C8	GUA	74	-10.959 -16.403	8.597	1.00	0.00
ATOM	717	N7	GUA	74	-9.829 -16.720	8.036	1.00	0.00
ATOM	718	C5	GUA	74	-9.156 -17.417	9.029	1.00	0.00
ATOM	719	C6	GUA	74	-7.883 -18.054	8.984	1.00	
ATOM	720	06	GUA	74	-7.115 -18.136	8.032	1.00	
ATOM	721	N1	GUA	74	-7.541 -18.647	10.192	1.00	
ATOM	722	C2	GUA	74	-8.341 -18.658	11.312	1.00	
ATOM	723	N2	GUA	74	-7.829 -19.211	12.415	1.00	
ATOM	724	N3	GUA	74	-9.552 -18.079	11.351	1.00	
ATOM	725	C4	GUA	74	-9.907 -17.478	10.180	1.00	
ATOM	726	C3'	GUA	74	-14.295 -15.513	11.153	1.00	
ATOM	727	C2'	GUA	74	-12.808 -15.307	10.869	1.00	
ATOM	728	03'	GUA	74	-14.588 -15.788	12.513	1.00	
ATOM	729	P	THY	75	-14.433 -14.681	13.680	1.00	
ATOM	730		THY	75	-15.321 -15.057	14.801	1.00	
ATOM	731		THY	75	-14.533 -13.333	13.079	1.00	
ATOM	732	05'		75	-12.913 -14.920	14.141	1.00	
ATOM	733	C5'		75	-12.533 -16.133	14.759	1.00	
ATOM	734	C4'	THY	75	-11.010 -16.234	14.825	1.00	
ATOM	735	04'	THY	75	-10.435 -16.093	13.542	1.00	
ATOM	736	C1'	THY	75	-9.085 -15.743	13.735	1.00	
ATOM	737	N1	THY	75	-8.455 -15.284	12.463	1.00	
ATOM	738	C6	THY	75	-9.135 -14.465	11.591	1.00	
ATOM	739	C5	THY	75	-8.641 -14.181	10.357	1.00	
ATOM	740	C7	THY	75	-9.495 -13.280	9.484	1.00	
ATOM	741	C4	THY	75	-7.372 -14.721	9.904	1.00	
ATOM	742	04	THY	75	-6.864 -14.574	8.792	1.00	
ATOM	743	N3	THY		-6.729 -15.481	10.860	1.00	
ATOM	744	C2	THY	75	-7.203 -15.797	12.123	1.00	0.00
ATOM	745	02	THY	75	-6.533 -16.498	12.875	1.00	0.00
ATOM	746	C3'	THY	75	-10.345 -15.152	15.688	1.00	0.00

```
687
                                                                   688
                                 -9.233 -14.631 14.765 1.00 0.00
ATOM
        747 C2' THY
                         75
             03'
                 THY
                                 -9.876 -15.771
                                                  16.875
                                                                0.00
ATOM
        748
                         75
                                                          1.00
ATOM
        749
             P
                 THY
                         76
                                 -9.045 -14.991
                                                  18.019
                                                          1.00
                                                                0.00
             OP1 THY
                                                  17.704
ATOM
        750
                         76
                                 -9.025 -13.544
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OP2 THY
ATOM
        751
                         76
                                 -9.515 -15.457
                                                  19.342
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        752
             05'
                 THY
                         76
                                 -7.564 -15.576
                                                  17.771
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        753
             C5' THY
                         76
                                 -7.293 -16.958
                                                  17.926
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        754
             C4'
                 THY
                         76
                                 -5.860 -17.267
                                                  17.484
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 THY
ATOM
        755
             04'
                         76
                                 -5.689 -16.812
                                                  16.152
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        756
             C1'
                 THY
                         76
                                 -4.483 -16.093
                                                  16.023
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        757
             N1
                 THY
                         76
                                 -4.636 -15.094
                                                  14.922
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        758
             6
                  THY
                         76
                                  -5.565 -14.083
                                                  15.026
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 THY
ATOM
        759
             C5
                         76
                                  -5.794 -13.223
                                                  14.001
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        760
             C7
                  THY
                         76
                                  -6.831 -12.135
                                                  14.219
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C4
                 THY
                                  -5.084 -13.337
                                                  12.747
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        761
                         76
ATOM
        762
             04
                  THY
                         76
                                  -5.257 -12.614
                                                  11.770
                                                          1.00
                                                                 0.00
             N3
                  THY
                                                  12.703
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        763
                         76
                                  -4.170 -14.376
ATOM
        764
             C2
                  THY
                         76
                                  -3.920 -15.273
                                                 13.734
                                                          1.00
                                                                 0.00
             02
                  THY
        765
                         76
                                  -3.100 -16.173
                                                  13.573
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
        766
             C3'
                 THY
                         76
                                  -4.808 -16.557
                                                  18.346
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C2'
                 THY
                                  -4.291 -15.465
                                                  17.407
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        767
                         76
ATOM
        768
             03'
                 THY
                         76
                                  -3.810 -17.488
                                                  18.737
                                                          1.00
                                                                 0.00
             P
                  ADE
                         77
                                  -2.658 -17.122
                                                  19.812
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        769
ATOM
        770
             OP1 ADE
                         77
                                  -2.179 -18.394
                                                  20.403
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OP2 ADE
                         77
                                  -3.146 -16.042
                                                  20.694
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        771
ATOM
        772
             05' ADE
                         77
                                  -1.496 -16.530
                                                  18.866
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C5' ADE
                         77
ATOM
        773
                                  -0.750 -17.390
                                                  18.032
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        774
             C4' ADE
                         77
                                  0.031 - 16.612
                                                  16.973
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        775
             04'
                  ADE
                         77
                                  -0.806 -15.844
                                                  16.130
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        776
              C1'
                 ADE
                         77
                                  -0.003 -14.830
                                                  15.566
                                                          1.00
                                                                 0.00
              N9
                  ADE
                         77
                                  -0.845 -13.782
                                                  14.952
ATOM
        777
                                                          1.00
                                                                 0.00
        778
              C8
                  ADE
                         77
                                  -1.986 -13.209
                                                  15.455
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
        779
              N7
                  ADE
                         77
                                  -2.588 -12.398
                                                  14.632
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        780
              C5
                  ADE
                         77
                                  -1.763 - 12.403
                                                  13.516
                                                           1.00
                                                                 0.00
              63
                  ADE
                                  -1.826 -11.731
                                                  12.282
ATOM
        781
                         77
                                                           1.00
                                                                 0.00
              N6
                  ADE
                         77
                                  -2.842 -10.928 11.964
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        782
                  ADE
                                  -0.809 -11.874
ATOM
        783
              N1
                         77
                                                  11.413
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C2
                  ADE
                         77
                                   0.203 - 12.674
                                                  11.740
                                                                 0.00
ATOM
        784
                                                          1.00
              N3
                  ADE
                         77
                                   0.356 - 13.406
                                                 12.841
                                                                 0.00
ATOM
         785
                                                           1.00
                  ADE
ATOM
         786
              C4
                         77
                                  -0.674 -13.213 13.710
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         787
              C3'
                  ADE
                         77
                                   1.103 -15.647 17.505
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             C2'
                  ADE
                         77
                                   0.745 -14.335
                                                  16.800
                                                                 0.00
         788
                                                          1.00
ATOM
         789
              03'
                  ADE
                         77
                                   2.348 -16.179
                                                  17.088
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  GUA
                                   3.768 -15.737
ATOM
         790
              P
                         78
                                                  17.704 1.00
                                                                 0.00
                                                                 0.00
ATOM
         791
              OP1 GUA
                         78
                                   3.593 - 15.483
                                                  19.150
                                                           1.00
ATOM
         792
              OP2 GUA
                         78
                                   4.762 -16.738
                                                  17.245
                                                           1.00
                                                                 0.00
              05' GUA
ATOM
         793
                         78
                                   4.054 -14.335
                                                  16.959
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C5'
                  GUA
                                   4.660 -14.307
ATOM
         794
                          78
                                                  15.682
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         795
              C4'
                  GUA
                          78
                                   4.527 -12.955
                                                  14.982 1.00
                                                                 0.00
ATOM
         796
              04' GUA
                          78
                                   3.186 -12.608 14.700 1.00 0.00
```

	con				(0.10)				000
ATOM	689	C1'	CIIA	70	2 227	11 054	14 212	1 00	690
ATOM	797	C1'	GUA	78 79		-11.254	14.313	1.00	0.00
ATOM	798	N9	GUA	78 70		-10.648	14.244	1.00	0.00
ATOM	799	C8	GUA	78 70		-10.650	15.198	1.00	0.00
ATOM	800	N7	GUA	78 70	-0.175	-9.983	14.859	1.00	0.00
ATOM	801	C5	GUA	78	0.117	-9.500	13.588	1.00	0.00
ATOM	802	C6	GUA	78	-0.666	-8.702	12.696	1.00	0.00
ATOM	803	06	GUA	78	-1.793	-8.245	12.875	1.00	0.00
ATOM	804	N1	GUA	78	-0.021	-8.456	11.488	1.00	0.00
ATOM	805	C2	GUA	78	1.242	-8.915	11.176	1.00	0.00
ATOM	806	N2	GUA	78	1.766	-8.541	10.007	1.00	0.00
ATOM	807	N3	GUA	78	1.985	-9.654	12.012	1.00	0.00
ATOM	808	C4	GUA	78	1.368	-9.915	13.197	1.00	0.00
ATOM	809	C3'	GUA	78	5.092	-11.754	15.751	1.00	0.00
ATOM	810	C2'	GUA	78	4.053	-10.662	15.450	1.00	0.00
ATOM	811	03'	GUA	78	6.395	-11.496	15.256	1.00	0.00
MOTA	812	P	GUA	79	7.272	-10.219	15.705	1.00	0.00
ATOM	813	0P1	GUA	79	8.703	-10.563	15.550	1.00	0.00
ATOM	814	0P2	GUA	79	6.765	-9.721	17.002	1.00	0.00
MOTA	815	05'	GUA	79	6.882	-9.155	14.560	1.00	0.00
ATOM	816	C5'	GUA	79	7.180	-9.414	13.201	1.00	0.00
ATOM	817	C4'	GUA	79	6.584	-8.329	12.300	1.00	0.00
ATOM	818	04'	GUA	79	5.177	-8.265	12.464	1.00	0.00
ATOM	819	C1'	GUA	79	4.775	-6.920	12.330	1.00	0.00
ATOM	820	N9	GUA	79	3.440	-6.706	12.929	1.00	0.00
ATOM	821	C8	GUA	79	3.001	-7.070	14.177	1.00	0.00
ATOM	822	N7	GUA	79	1.765	-6.745	14.425	1.00	0.00
ATOM	823	C5	GUA	79	1.351	-6.102	13.264	1.00	0.00
ATOM	824	С6	GUA	79	0.096	-5.507	12.943	1.00	0.00
ATOM	825	06	GUA	79	-0.910	-5.440	13.644	1.00	0.00
ATOM	826	N1	GUA	79	0.078	-4.949	11.668	1.00	0.00
ATOM	827	C2	GUA	79	1.150	-4.960	10.801	1.00	0.00
ATOM	828	N2	GUA	79	1.014	-4.329	9.633	1.00	0.00
ATOM	829	N3	GUA	79	2.331	-5.521	11.098	1.00	0.00
ATOM	830	C4	GUA	79	2.369	-6.073	12.341	1.00	0.00
ATOM	831	C3'	GUA	79	7.116	-6.921	12.612	1.00	0.00
ATOM	832	C2'	GUA	79	5.863	-6.212	13.128	1.00	0.00
ATOM	833	03'	GUA	79	7.622		11.415	1.00	0.00
ATOM	834	P	GUA	80	8.353	-4.915	11.377	1.00	0.00
ATOM	835	0P1	GUA	80	8.781	-4.559	12.748	1.00	0.00
ATOM	836	0P2	GUA	80	9.343		10.277	1.00	0.00
ATOM	837	05'	GUA	80	7.152		10.958	1.00	0.00
ATOM	838	C5'	GUA	80	6.639		9.640	1.00	0.00
ATOM	839	C4'	GUA	80	5.506		9.511	1.00	0.00
ATOM	840	04'	GUA	80	4.428		10.356	1.00	0.00
ATOM	841	C1'	GUA	80	3.846		10.864	1.00	0.00
ATOM	842	N9	GUA	80	3.012		12.052	1.00	0.00
ATOM	843	C8	GUA	80	3.360		13.210	1.00	0.00
ATOM	844	N7	GUA		2.394			1.00	0.00
ATOM	845	C5	GUA	80	1.322		13.458	1.00	0.00
ATOM	846	C6	GUA	80	-0.015		13.910	1.00	0.00
						_			

692 691 **ATOM** 847 06 GUA 80 -0.519 -2.617 14.975 1.00 0.00 ATOM 848 N1 GUA 80 -0.786-1.574 12.985 1.00 0.00 ATOM 849 C2 GUA 80 -0.334-1.15111.752 1.00 0.00 -0.48810.969 ATOM 850 N2GUA 80 -1.1891.00 0.00 **GUA** 0.00 ATOM 851 N3 80 0.916 - 1.35911.317 1.00 ATOM 852 C4 GUA 80 1.693 -2.024 12.215 1.00 0.00 C3, GUA 5.917 -1.491 9.945 1.00 ATOM 853 80 0.00 ATOM 854 C2**'** GUA 80 5.083 -1.27111.205 1.00 0.00 03' GUA 5.563 -0.5408.960 1.00 ATOM 855 80 0.00 05' ATOM 856 CYT 81 -9.7611.905 14.181 1.00 0.00 C5' CYT ATOM 857 81 -9.1862.843 13.295 1.00 0.00 C4' -7.951 ATOM 858 CYT 81 2.254 12.606 1.00 0.00 04' CYT -7.0001.803 13.549 0.00 ATOM 859 81 1.00 C1' CYT -6.1230.940 12.859 ATOM 860 81 1.00 0.00 CYT -5.3380.00 N1 81 0.085 13.782 1.00 ATOM 861 ATOM 862 60 CYT 81 -5.954-0.51814.851 1.00 0.00 CYT -5.302 863 С5 -1.40615.635 1.00 0.00 ATOM 81 ATOM 864 C4 CYT 81 -3.931-1.67715.308 1.00 0.00 CYT -3.223 -2.5410.00 865 N4 81 16.038 1.00 ATOM ATOM 866 N3 CYT 81 -3.342-1.10414.250 1.00 0.00 C2 CYT -4.020-0.22813.457 1.00 0.00 ATOM 867 81 02 CYT 0.252 ATOM 868 81 -3.469 12.470 1.00 0.00 C3' CYT -8.2541.020 11.742 1.00 0.00 ATOM 869 81 1.00 ATOM 870 C2' CYT 81 -7.090 0.080 12.059 0.00 03' CYT -8.314 ATOM 871 81 1.397 10.376 1.00 0.00 872 P CYT -8.634 0.337 9.199 ATOM 82 1.00 0.00 ATOM 873 OP1 CYT 82 -9.2771.074 8.088 1.00 0.00 ATOM 874 OP2 CYT 82 -9.316-0.8309.800 1.00 0.00 05' CYT -7.167ATOM 875 82 -0.1388.716 1.00 0.00 C5' CYT -6.293 0.741 0.00 ATOM 876 82 8.029 1.00 ATOM 877 C4' CYT 82 -5.0310.004 1.00 0.00 7.562 04' CYT **ATOM** 878 82 -4.288-0.4688.670 1.00 0.00 ATOM 879 C1' CYT 82 -3.800-1.7718.420 1.00 0.00 N1 CYT 82 -3.727-2.4741.00 0.00 ATOM 880 9.721 ATOM 881 60 CYT 82 -4.820-2.440 10.540 1.00 0.00 C5 CYT -3.019882 82 -4.82411.753 1.00 0.00 ATOM ATOM 883 C4 CYT 82 -3.615-3.68212.153 1.00 0.00 ATOM 884 N4 CYT 82 -3.550-4.29613.335 1.00 0.00 N3 CYT -3.73611.340 ATOM 885 82 -2.5491.00 0.00 ATOM 886 C2 CYT 82 -2.571-3.14710.109 1.00 0.00 ATOM 887 02 CYT 82 -1.589-3.2249.374 1.00 0.00 CYT -1.224ATOM 888 C3' 82 -5.3506.697 1.00 0.00 C2' CYT -4.889-2.400ATOM 889 82 7.553 1.00 0.00 ATOM 890 03' CYT 82 -4.652-1.1005.468 1.00 0.00 CYT -2.1190.00 ATOM 891 P 83 -4.8664.237 1.00 ATOM 892 OP1 CYT 83 -4.606-1.3842.980 1.00 0.00 OP2 CYT -2.823 1.00 0.00 ATOM 893 83 -6.1534.427 05' CYT -3.677-3.179ATOM 894 83 4.462 1.00 0.00 ATOM 895 C5' CYT 83 -2.350-2.9124.041 1.00 0.00 C4' CYT -1.428 -4.048ATOM 896 83 4.498, 1.00 0.00

	cna				(0.00)				004
ATOH	693	04'	CVT	00	1 404	4 100	5 004	1 00	694
ATOM	897	04'	CYT	83	-1.494	-4.169	5.904	1.00	0.00
ATOM	898	C1'	CYT	83	-1.057	-5.456	6.282	1.00	0.00
ATOM	899	N1	CYT	83	-1.747	-5.883	7.524	1.00	0.00
ATOM	900	C6	CYT	83	-3.079	-5.614	7.669	1.00	0.00
ATOM	901	C5	CYT	83	-3.745	-5.908	8.806	1.00	0.00
ATOM	902	C4	CYT	83	-2.991	-6.556	9.845	1.00	0.00
ATOM	903	N4	CYT	83	-3.576	-6.879	10.998	1.00	0.00
ATOM	904	N3	CYT	83	-1.707	-6.904	9.662	1.00	0.00
ATOM	905	C2	CYT	. 83	-1.058	-6.595	8.503	1.00	0.00
ATOM	906	02	CYT	83	0.104	-6.959	8.329	1.00	0.00
ATOM	907	C3,	CYT	83	-1.870	~5.419	3.975	1.00	0.00
ATOM	908	C2'	CYT	83	-1.501	-6.349	5.129	1.00	0.00
ATOM	909	03'	CYT	83	-1.212	-5.760	2.765	1.00	0.00
ATOM	910	P	THY	84	-1.538	-7.131	1.965	1.00	0.00
ATOM	911	0P1	THY	84	-2.974	-7.447	2.130	1.00	0.00
ATOM	912	0P2	THY	84	-0.964	-7.024	0.605	1.00	0.00
ATOM	913	05'	THY	84	-0.696	-8.243	2.772	1.00	0.00
ATOM	914	C5'	THY	84	0.714	-8.310	2.685	1.00	0.00
ATOM	915	C4'	THY	84	1.274	-9.277	3.732	1.00	0.00
ATOM	916	04'	THY	84	1.051	-8.816	5.054	1.00	0.00
ATOM	917	C1'	THY	84	1.085	-9.912	5.956	1.00	0.00
ATOM	918	N1	THY	84	-0.138	-9.967	6.808	1.00	0.00
ATOM	919	C6	THY	84	-1.359	-9.536	6.340	1.00	0.00
ATOM	920	C5	THY	84	-2.466	-9.581	7.122	1.00	0.00
ATOM	921	С7	THY	84	-3.773	-9.121	6.502	1.00	0.00
ATOM	922	C4	THY	84		-10.061	8.486	1.00	0.00
ATOM	923	04	THY	84		-10.065	9.280	1.00	0.00
ATOM	924	N3	THY	84		-10.548	8.860	1.00	0.00
ATOM	925	C2	THY	84		-10.561	8.066	1.00	0.00
ATOM	926	02	THY	. 84		-11.091	8.471	1.00	0.00
ATOM	927	C3'	THY	84	0.595	-10.643	3.747	1.00	0.00
ATOM	928	C2'	THY	84		-11.149	5.061	1.00	0.00
ATOM	929	03'	THY	84		-11.433	2.624	1.00	0.00
ATOM	930	P	ADE	85		-12.828	2.326	1.00	0.00
ATOM	931		ADE	85		-12.652	2.649	1.00	0.00
ATOM	932		ADE	85		-13.258	0.949	1.00	0.00
ATOM	933		ADE	85		-13.860	3.384	1.00	0.00
ATOM	934	C5'	ADE	85		-14.074	3.486	1.00	0.00
ATOM	935	C4'	ADE	85		-14.814	4.793	1.00	0.00
ATOM	936	04'	ADE	85		-14.244	5.887	1.00	0.00
ATOM	937	C1'	ADE	85		-15.199	6.503	1.00	0.00
ATOM	938	N9	ADE	85		-14.586	6.912	1.00	0.00
ATOM	939	C8	ADE	85		-13.867	6.141	1.00	0.00
ATOM	940	N7	ADE	85		-13.428	6.776	1.00	0.00
ATOM	941	C5	ADE	85		-13.913	8.061	1.00	0.00
ATOM	942	C6	ADE	85		-13.821	9.226	1.00	0.00
ATOM	943	N6	ADE	85		-13.171	9.243	1.00	0.00
ATOM	944	N1	ADE	85		-14.419	10.350	1.00	0.00
ATOM	945	C2	ADE	85		-15.072	10.310	1.00	0.00
ATOM	946	N3	ADE	85		-15.250	9.279	1.00	0.00
	J 13				2	10.000	0.5.0		3.33

					(349)			特開20
	695							696
ATOM	947	C4	ADE	85	-0.911 -14.63	1 8.160	1.00	0.00
ATOM	948	C3'	ADE	85	2.122 -16.28	8 4.745	1.00	0.00
ATOM	949	C2'	ADE	85	0.752 -16.24	6 5.415	1.00	0.00
ATOM	950	03'	ADE	85	3.082 -17.03	7 5.472	1.00	0.00
ATOM	951	P	ADE	86	3.037 -18.64	4 5.539	1.00	0.00
ATOM	952	0P1	ADE	86	2.087 -19.12	7 4.516	1.00	0.00
ATOM	953	0P2	ADE	86	4.433 -19.15	1 5.515	1.00	0.00
ATOM	954	05'	ADE	86	2.392 -18.93	7 6.983	1.00	0.00
ATOM	955	C5'	ADE	86	3.019 -18.51	3 8.175	1.00	0.00

AIUM UΒ AUL 900 C4' ADE 9.405 1.00 0.00 956 86 2.219 -18.963 ATOM 04' ADE 957 86 0.928 - 18.3781.00 0.00 ATOM 9.421 1.00 ATOM 958 C1' ADE -0.082 -19.372 9.387 0.00 86 N9 ADE -1.221 -18.839 1.00 0.00 ATOM 959 86 8.596 ATOM 960 С8 ADE 86 -1.294 -18.635 7.241 1.00 0.00 ATOM 961 N7 ADE -2.293 -17.885 6.858 1.00 0.00 86 0.00 ATOM 962 С5 ADE -2.972 -17.616 8.039 1.00 86 ATOM 963 63 ADE 86 -4.131 -16.868 8.341 1.00 0.00 ATOM 964 N6 ADE 86 -4.825 -16.171 7.438 1.00 0.00 ATOM N1 ADE -4.536 -16.805 965 86 9.621 1.00 0.00 C2ADE -3.840 -17.440 0.00 ATOM 966 86 10.551 1.00 ATOM N3 ADE -2.723 -18.146 10.407 1.00 0.00 967 86 ATOM 968 C4 ADE -2.335 -18.207 9.102 1.00 0.00 86 **ATOM** 969 C3' ADE 1.997 -20.477 9.463 1.00 0.00 86 ATOM 970 C2' ADE 86 0.614 - 20.6128.818 1.00 0.00 ATOM 971 03' ADE 1.996 -20.849 10.828 1.00 0.00 86 ATOM 972 P CYT 2.312 -22.348 11.336 1.00 0.00 87 ATOM 973 OP1 CYT 87 3.486 -22.274 12.240 1.00 0.00 ATOM 974 OP2 CYT 2.344 -23.270 10.173 1.00 0.00 05' CYT ATOM 975 87 0.987 - 22.64812.209 1.00 0.00 C5' CYT 0.806 -22.036 ATOM 976 87 13.475 1.00 0.00 ATOM 977 C4' CYT -0.673 -21.767 13.781 0.00 87 1.00 978 04' CYT -1.307 -21.094 0.00 ATOM 87 12.701 1.00 C1' CYT ATOM 979 87 -2.674 -21.450 12.704 1.00 0.00 N1 CYT -3.340 -21.159 **ATOM** 980 87 11.404 1.00 0.00 ATOM 981 60 CYT 87 -2.774 -21.581 10.225 1.00 0.00 ATOM 982 C5 CYT 87 -3.368 -21.356 9.030 1.00 0.00 -4.614 -20.650 ATOM 983 C4 CYT 87 9.044 1.00 0.00 ATOM 984 N4 CYT 87 -5.222 -20.316 7.906 1.00 0.00 985 ATOM N3 CYT -5.171 -20.255 10.195 0.00 87 1.00 ATOM 986 C2 CYT 87 -4.566 -20.48811.393 1.00 0.00 ATOM 987 02 CYT 87 -5.102 -20.084 12.422 1.00 0.00 C3' CYT **ATOM** 988 87 -1.524 -23.01614.065 1.00 0.00 C2' CYT ATOM 989 87 -2.547 -22.94912.934 1.00 0.00 03' CYT -2.096 -22.885 15.360 ATOM 990 87 1.00 0.00 -3.152 -23.949 991 P CYT 88 15.960 1.00 0.00 ATOM **ATOM** 992 OP1 CYT 88 -3.006 -25.225 15.228 1.00 0.00 ATOM OP2 CYT -3.045 -23.929 993 88 17.441 1.00 0.00 05' CYT ATOM 994 88 -4.565 -23.288 15.561 1.00 0.00 ATOM 995 C5' CYT 88 -4.975 -22.045 16.107 1.00 0.00

ATOM

996

C4' CYT

88

-6.440 -21.755 15.778 1.00 0.00

```
697
                                                                   698
             04' CYT
ATOM
        997
                         88
                                 -6.576 -21.562 14.391 1.00 0.00
ATOM
        998
             C1'
                 CYT
                         88
                                 -7.737 -22.198
                                                  13.908
                                                         1.00
                                                                0.00
                 CYT
ATOM
        999
             N1
                         88
                                 -7.436 -22.633
                                                  12.527
                                                          1.00
                                                                0.00
             60
                 CYT
                                                                0.00
ATOM
       1000
                         88
                                 -6.275 -23.316
                                                  12.279
                                                          1.00
                 CYT
ATOM
       1001
             C5
                         88
                                 -5.864 -23.595
                                                  11.028
                                                          1.00
                                                                0.00
       1002 C4
                 CYT
ATOM
                         88
                                 -6.708 - 23.140
                                                   9.957
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
       1003
             N4
                 CYT
                         88
                                 -6.345 -23.303
                                                   8.685
                                                          1.00
                                                                0.00
       1004 N3
                 CYT
ATOM
                         88
                                 -7.866 -22.512
                                                  10.208
                                                          1.00
                                                                0.00
                 CYT
ATOM
       1005
             C2
                         88
                                 -8.268 -22.256
                                                  11.481
                                                          1.00
                                                                 0.00
             02
                 CYT
ATOM
       1006
                         88
                                 -9.348 -21.707
                                                  11.683
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C3'
                 CYT
ATOM
       1007
                         88
                                 -7.387 -22.902
                                                  16.158
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1008
            C2' CYT
                         88
                                 -7.901 -23.408
                                                  14.818
                                                          1.00
                                                                 0.00
             03'
                 CYT
ATOM
       1009
                         88
                                 -8.399 -22.378
                                                  17.004
                                                          1.00
                                                                 0.00
       1010 P
                 CYT
ATOM
                         89
                                 -9.609 -23.273
                                                  17.586
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OP1 CYT
ATOM
       1011
                         89
                                 -9.206 -24.696
                                                  17.531
                                                          1.00
                                                                0.00
       1012 OP2 CYT
ATOM
                         89
                                -10.042 -22.681
                                                  18.870
                                                          1.00
                                                                 0.00
             05' CYT
ATOM
       1013
                         89
                                -10.772 -23.035
                                                  16.494
                                                          1.00
                                                                 0.00
       1014 C5' CYT
                                                  16.352
ATOM
                                -11.408 -21.777
                                                          1.00
                                                                 0.00
       1015 C4'
                 CYT
ATOM
                         89
                                -12.372 -21.803
                                                  15.161
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1016 04' CYT
                         89
                                -11.662 -22.160
                                                  13.994
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1017
             C1' CYT
                                -12.518 -22.850
                                                  13.110
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         89
                 CYT
ATOM
       1018
             N1
                                -11.682 -23.713
                                                  12.241
                                                                 0.00
                         89
                                                          1.00
                 CYT
ATOM
       1019
             60
                                -10.710 -24.496
                                                  12.809
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         89
       1020
             C5
                 CYT
                                 -9.805 -25.165
ATOM
                         89
                                                  12.066
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C4
                 CYT
                                 -9.913 -25.026
                                                  10.641
ATOM
        1021
                         89
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
       1022
             N4
                 CYT
                                 -9.036 -25.627
                                                   9.837
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         89
ATOM
       1023
             N3
                 CYT
                                 -10.889 -24.295
                                                  10.085
                                                          1.00
                         89
                                                                 0.00
ATOM
       1024
             C2
                 CYT
                         89
                                 -11.801 -23.636
                                                  10.855
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1025
             02
                 CYT
                         89
                                 -12.712 -23.010
                                                  10.321
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C3' CYT
ATOM
        1026
                                 -13.497 -22.839
                                                  15.312
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         89
             C2' CYT
ATOM
        1027
                                 -13.375 -23.693
                                                  14.050
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         89
             03' CYT
ATOM
        1028
                         89
                                 -14.743 -22.167
                                                  15.424
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1029
             P
                  THY
                         90
                                 -16.145 -22.947
                                                  15.640
                                                          1.00
                                                                 0.00
        1030
             OP1 THY
                                 -17.112 -22.004
ATOM
                         90
                                                  16.244
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1031
              OP2 THY
                                 -15.867 -24.240
                                                  16.302
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         90
ATOM
        1032
              05' THY
                         90
                                 -16.622 -23.249
                                                  14.130
                                                          1.00
                                                                 0.00
              C5' THY
                                 -16.995 -22.202
                                                  13.255
                                                                 0.00
ATOM
        1033
                         90
                                                          1.00
ATOM
        1034
              C4'
                  THY
                                 -17.138 -22.729
                                                  11.824
                                                                 0.00
                         90
                                                           1.00
              04'
                  THY
                                 -15.925 -23.315
ATOM
        1035
                                                  11.395
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         90
ATOM
        1036
              C1'
                  THY
                         90
                                 -16.222 -24.279
                                                  10.411
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                 -15.060 -25.192
ATOM
        1037
              N1
                  THY
                         90
                                                  10.247
                                                           1.00
                                                                 0.00
        1038
              C6
                  THY
                                 -14.535 -25.830
ATOM
                         90
                                                  11.345
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1039
              C5
                  THY
                         90
                                 -13.447 -26.629
                                                  11.242
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1040
              С7
                  THY
                         90
                                 -12.986 -27.306
                                                  12.519
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  THY
                                 -12.776 -26.830
ATOM
        1041
              C4
                         90
                                                   9.977
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1042
             04
                  THY
                         90
                                 -11.785 -27.533
                                                   9.808
                                                          1.00
                                                                 0.00
              N3
                  THY
ATOM
        1043
                         90
                                 -13.342 -26.136
                                                   8.919
                                                           1.00
                                                                 0.00
        1044
              C2
                  THY
                                 -14.482 - 25.348
ATOM
                         90
                                                   8.985
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        1045
              02
                  THY
                         90
                                 -14.944 - 24.848
                                                   7.963
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C3' THY
ATOM
        1046
                         90
                                 -18.209 -23.822 11.665 1.00 0.00
```

699 700 1.00 0.00 ATOM 1047 C2' THY 90 -17.432 -24.980 11.027 1.00 THY -19.250 -23.315 0.00 ATOM 1048 03' 90 10.845 1.00 0.00 ATOM 1049 P ADE 91 -20.596 -24.149 10.526 OP1 ADE -21.640 -23.191 1.00 0.00 ATOM 1050 91 10.098 OP2 ADE -20.861 -25.076 11.649 1.00 0.00 ATOM 1051 91 05' 1.00 ATOM 1052 ADE 91 -20.159 -25.018 9.246 0.00 C5' ADE 91 -19.948 -24.410 7.988 1.00 0.00 ATOM 1053 C4' ADE -19.307 -25.402 ATOM 1054 91 7.015 1.00 0.00 ADE 0.00 04' 91 -18.034 -25.822 7.456 1.00 ATOM 1055 C1' ADE 1.00 0.00 ATOM 1056 91 -17.717 - 26.9856.729 N9 0.00 ATOM 1057 ADE 91 -16.614 - 27.7117.384 1.00 ADE -16.478 -28.003 1.00 0.00 ATOM 1058 С8 91 8.714 ADE -15.375 -28.630 9.015 1.00 0.00 ATOM 1059 N7 91 C5 ADE -14.745 -28.785 7.782 1.00 0.00 ATOM 1060 91 **C6** ADE -13.526 -29.370 7.387 1.00 0.00 ATOM 1061 91 ATOM 1062 N6 ADE 91 -12.664 -29.905 8.256 1.00 0.00 N1 ADE -13.220 -29.401 6.076 1.00 0.00 ATOM 1063 91 ATOM 1064 C2ADE 91 -14.068 -28.866 5.202 1.00 0.00 N3 ADE 91 -15.224 -28.259 5.446 1.00 0.00 ATOM 1065 ADE -15.508 -28.251 1.00 0.00 ATOM 1066 C4 91 6.775 C3' ADE -20.101 -26.704 6.829 1.00 0.00 ATOM 1067 91 ATOM 1068 C2**'** ADE -19.010 -27.781 6.835 1.00 0.00 91 03' ADE -20.830 -26.599 **ATOM** 1069 91 5.618 1.00 0.00 ADE -21.712 -27.805 0.00 ATOM 1070 P 92 5.006 1.00 OP1 ADE -22.726 -27.219 1.00 0.00 ATOM 1071 92 4.103 ATOM 1072 OP2 ADE -22.130 -28.700 6.107 1.00 0.00 92 ATOM 1073 05' ADE 92 -20.629 -28.583 4.102 1.00 0.00 ATOM 1074 C5' ADE 92 -19.984 - 27.9383.020 1.00 0.00 ADE ATOM 1075 C4' 92 -18.926 -28.8562.403 1.00 0.00 1076 04' ADE 92 -17.930 -29.178 0.00 ATOM 3.361 1.00 1077 C1' ADE 92 -17.536 -30.521 3.179 1.00 0.00 ATOM **ATOM** 1078 N9 ADE 92 -16.897 -31.036 4.412 1.00 0.00 ATOM 1079 68 ADE 92 -17.399 -31.023 5.690 1.00 0.00 ADE 1080 N7 92 -16.592 -31.501 6.595 1.00 0.00 ATOM ATOM 1081 C5 ADE 92 -15.470 -31.8645.863 1.00 0.00 1082 60 ADE 92 -14.239 -32.442 6.230 1.00 0.00 ATOM ATOM 1083 N6 ADE 92 -13.950 -32.7447.497 1.00 0.00 ATOM 1084 N1 ADE 92 -13.329 -32.692 5.271 1.00 0.00 C2ADE -13.631 -32.385 1.00 0.00 ATOM 1085 92 4.011 1086 N3 ADE 92 -14.749 -31.842 3.536 1.00 0.00 ATOM 1087 **C4** ADE 92 -15.645 -31.594 4.529 1.00 0.00 ATOM ADE ATOM 1088 C3' 92 -19.512 -30.1941.925 1.00 0.00 1.00 1089 C2' ADE 92 -18.888 -31.181 2.915 0.00 ATOM **ATOM** 1090 03' ADE 92 -19.112 -30.407 0.584 1.00 0.00 1091 P CYT 93 -19.637 -31.655 -0.2941.00 0.00 ATOM ATOM 1092 OP1 CYT 93 -20.702 -32.358 0.454 1.00 0.00 ATOM 1093 OP2 CYT -19.890 -31.186 0.00 93 -1.6741.00 05' CYT -18.339 -32.600 **ATOM** 1094 93 -0.3121.00 0.00 ATOM 1095 C5' CYT 93 -17.192 -32.255 -1.0671.00 0.00 1096 C4' CYT 93 -16.083 -33.271 -0.790 1.00 0.00 ATOM

		701				(352)				特開 2 ( 702	003-135087
	ATOM	1097	04'	CVT	93	-15.823	_22_201	0.59	4 1 00	0.00	
	ATOM	1098		CYT	93						
	ATOM					-15.334		0.95		0.00	
		1099	N1	CYT	93	-15.604				0.00	•
	ATOM	1100	C6	CYT	93	-16.808				0.00	
٠	ATOM	1101		CYT	. 93	-17.067				0.00	
	ATOM	1102	C4	CYT	93	-16.019				0.00	
	ATOM	1103	N4	CYT	93	-16.148				0.00	
	ATOM	1104	N3	CYT	93	-14.859				0.00	
	ATOM	1105		CYT	93	-14.621	-35.357			0.00	
	ATOM	1106		CYT	93	-13.552			7 1.00	0.00	
	ATOM	1107	C3'	CYT	93	-16.488	-34.708	-1.14	5 1.00	0.00	
	ATOM	1108	C2'	CYT	93	-16.160	-35.523	0.10	3 1.00	0.00	
	ATOM	1109	03'	CYT	. 93	-15.747	-35.176	-2.25	2 1.00	0.00	
	END										
	HEADER	0000	00								
	REMARK 0.000		0.0	0538	1.67254	0.025	38 0.0	1829	2.53799	1.719	37
	REMARK		2.6	4321	0.33222	0.517	18 1.1	2315	0.67067		
	REMARK		0.0	1025	0.00571	0.007	46 0:0	1792	0.00796		
	REMARK			123	119		4	0	0		0
	REMARK	0		1378	305	A	60	273	340		
	KEMMIK			1010	303	, 121	30	210	340		
	REMARK		0.0	3431	0.15300	0.028	0.0	5196	0.14399	0.153	00
	REMARK		2.2	1283	0.18008						
	REMARK			1	0		1	0	0		0
		0	N1	CHI	1	A 100	25 170	20 61	E 1 00	0.00	
	ATOM	1	N	GLU	1.		-25.179				
	ATOM	2	CA	GLU	1		-24.053			0.00	
	ATOM	3	CB	GLU	1		-24.303				
	ATOM	4	CC	GLU	1		-25.738				
	ATOM	5	CD	GLU	1		-26.219				
	ATOM	6		GLU	1		-26.011				
	ATOM	7		GLU	1		-26.748				
	ATOM	8	C	GLU	1		-22.717				
	ATOM	9	0	GLU	1		-21.827				
	ATOM	10	N	LYS	2		-22.569				
	ATOM	11	CA	LYS	2		-21.346				
	ATOM	12	CB	LYS	2		-21.326				
	ATOM	13	CG	LYS	2		-21.304				
	ATOM	14	CD	LYS	2		-21.240				
	ATOM	15	CE	LYS	2		-21.320				
	ATOM	16	NZ	LYS	2		-20.172				
	ATOM	17	C	LYS	2		-21.207				
	ATOM	18	0	LYS	2	-2.049	-21.341	31.91	in 1.00	0.00	

					(353)			特開2(
	703							704
ATOM	19	N	HIS	3	-2.047 -20.936	29.684	1.00	0.00
ATOM	20	CA	HIS	3	-0.617 -20.758	29.446	1.00	0.00
ATOM	21	CB	HIS	3	0.160 -22.016	29.888	1.00	0.00
ATOM	22	CG	HIS	3	-0.361 -23.319	29.325	1.00	0.00
ATOM	23	ND1		3	-0.057 -24.543	29.903	1.00	0.00
ATOM	24	CE1		3	-0.672 -25.493	29.179	1.00	0.00
ATOM	25	NE2		3	-1.368 -24.994	28.156	1.00	0.00
ATOM	26	CD2		3	-1.166 -23.621	28.251	1.00	0.00
ATOM	27	C	HIS	3	-0.458 -20.424	27.953	1.00	0.00
ATOM	28	0 N	HIS	3	-1.311 -19.737	27.394	1.00	0.00
ATOM	29	N CA	ARG	4 4	0.594 -20.923	27.294	1.00	0.00
ATOM Atom	30 31	CA CB	ARG ARG	4	0.847 -20.753 1.654 -19.478	25.870 25.569	1.00	0.00
ATOM	32	CG	ARG	4	3.105 -19.506	26.073	1.00	0.00
ATOM	33	CD	ARG	4	3.818 -18.166	25.824	1.00	0.00
ATOM	34	NE	ARG	4	3.904 -17.831	24.390	1.00	0.00
ATOM	35	CZ	ARG	4	4.409 -16.686	23.890	1.00	0.00
ATOM	36		ARG	4	4.926 -15.759	24.708	1.00	0.00
ATOM	37		ARG	4	4.398 -16.468	22.567	1.00	0.00
ATOM	38	C	ARG	4	1.510 -22.042	25.377	1.00	0.00
ATOM	39	0	ARG	4	2.044 -22.802	26.186	1.00	0.00
ATOM	40	N	ALA	5	1.462 -22.305	24.066	1.00	0.00
ATOM	41	CA	ALA	5	2.022 -23.522	23.487	1.00	0.00
ATOM	42	CB	ALA	5	1.000 -24.658	23.619	1.00	0.00
ATOM	43	C	ALA	5	2.424 -23.341	22.023	1.00	0.00
ATOM	44	0	ALA	5	3.469 -23.852	21.622	1.00	0.00
ATOM	45	N	ARG	6	1.580 -22.637	21.255	1.00	0.00
ATOM	46	CA	ARG	6	1.684 -22.329	19.830	1.00	0.00
ATOM	47	CB	ARG		1.043 -20.956	19.569	1.00	0.00
ATOM	48	CG	ARG		0.587 -20.798	18.111	1.00	0.00
ATOM	49	CD	ARG	6	-0.783 -21.444	17.891	1.00	0.00
ATOM	50	NE	ARG	6	-1.809 -20.741			
ATOM	51		ARG	6	-2.874 -21.263			
ATOM	52		ARG	6	-3.218 -22.548			
ATOM	53		ARG	6	-3.582 -20.452		1.00	
ATOM ATOM	54 55	C 0	ARG	6 6	3.108 -22.340 3.961 -21.578	19.265	1.00	
ATOM	55 56	N	ARG LYS	7	3.353 -23.188	19.718 18.258	1.00	
ATOM	57	CA	LYS	7	4.643 -23.301	17.590	1.00	
ATOM	58	CB	LYS	7	4.947 -24.777	17.266	1.00	
ATOM	59	CG	LYS	7	4.754 -25.737	18.448	1.00	
ATOM	60	CD	LYS	7	5.595 -25.333	19.664	1.00	
ATOM	61	CE	LYS	7	5.333 -26.275	20.845	1.00	
ATOM	62	NZ	LYS	7	5.629 -25.608		1.00	
ATOM	63	С	LYS	7	4.644 -22.430		1.00	
ATOM	64	0	LYS	7	5.013 -22.905			
ATOM	65	N	ARG	8	4.234 -21.161			0.00
ATOM	66	CA	ARG	8	4.175 -20.187	15.387	1.00	0.00
ATOM	67	CB	ARG	8	3.685 -18.840			
ATOM	68	CG	ARG	8	3.626 -17.700	14.912	1.00	0.00

	705				706	
ATOM	69	CD	ARG	8	2.575 -17.884 13.808 1.00 0.00	
ATOM	70	NE	ARG	.8	1.211 -17.952 14.358 1.00 0.00	
ATOM	71	CZ	ARG	8	0.078 -17.664 13.695 1.00 0.00	
ATOM	72	NH1	ARG	. 8	-1.092 -17.677 14.343 1.00 0.00	
ATOM	73		ARG	8	0.101 -17.358 12.394 1.00 0.00	
ATOM	74	С	ARG	8	5.565 -20.063 14.760 1.00 0.00	
ATOM	75	0	ARG	8	6.469 -19.519 15.392 1.00 0.00	
ATOM	76	N	GLN	9	5.741 -20.577 13.537 1.00 0.00	
ATOM	77	CA	GLN	9	7.023 -20.560 12.845 1.00 0.00	
ATOM	78	СВ	GLN	9	7.756 -21.881 13.131 1.00 0.00	
ATOM	79	CG	GLN	9	7.070 -23.080 12.461 1.00 0.00	
ATOM	80	CD	GLN	9	7.485 -24.421 13.049 1.00 0.00	
ATOM	81		GLN	9	8.195 -25.196 12.412 1.00 0.00	
ATOM	82		GLN	9	7.020 -24.717 14.260 1.00 0.00	
ATOM	83	C	GLN	9	6.852 -20.304 11.346 1.00 0.00	
ATOM	84	0	GLN	9	5.986 -20.889 10.696 1.00 0.00	
ATOM	85	N	ALA	10	7.699 -19.429 10.794 1.00 0.00	
ATOM	86	CA	ALA	10	7.695 -19.092 9.378 1.00 0.00	
ATOM	87	CB	ALA	10	8.591 -17.872 9.147 1.00 0.00	
ATOM	88	C	ALA	10	8.192 -20.287 8.567 1.00 0.00	
ATOM	89	0	ALA	10	8.872 -21.160 9.108 1.00 0.00	
ATOM	90	N	TRP	11	7.858 -20.336   7.275   1.00   0.00	
ATOM	91	CA	TRP	11	8.293 -21.419 6.402 1.00 0.00	
ATOM	92	СВ	TRP	11	7.279 -21.675 5.292 1.00 0.00	
ATOM	93	CG	TRP	11	5.990 -22.304 5.734 1.00 0.00	
ATOM	94		TRP	11	5.105 -21.775 6.608 1.00 0.00	
ATOM	95		TRP	11	4.033 -22.625 6.774 1.00 0.00	
ATOM	96		TRP	11	4.179 -23.760 6.005 1.00 0.00	
ATOM	97		TRP	11	3.381 -24.898 5.825 1.00 0.00	
ATOM	98		TRP	11	3.819 -25.907 4.957 1.00 0.00	
ATOM	99		TRP	11	5.041 -25.771 4.279 1.00 0.00	
ATOM	100		TRP	11	5.833 -24.623 4.464 1.00 0.00	
ATOM	101		TRP	11	5.425 -23.587 5.333 1.00 0.00	
ATOM	102	C	TRP	11	9.689 -21.142 5.852 1.00 0.00	
ATOM	103	0	TRP	11	10.037 -20.001 5.549 1.00 0.00	
ATOM	104	N	LEU	12	10.479 -22.212 5.743 1.00 0.00	
ATOM	105	CA	LEU	12	11.849 -22.205 5.254 1.00 0.00	
ATOM	106	CB	LEU	12	12.734 -23.035 6.193 1.00 0.00	
ATOM	107	CG	LEU	12	12.781 -22.488 7.632 1.00 0.00	
ATOM	108	CD1	LEU	12	11.738 -23.154 8.541 1.00 0.00	
ATOM	109	CD2	LEU	12	14.175 -22.726 8.225 1.00 0.00	
ATOM	110	C	LEU	12	11.866 -22.737 3.823 1.00 0.00	
ATOM	111	0	LEU	12	10.911 -23.399 3.408 1.00 0.00	
ATOM	112	N	TRP	13	12.942 -22.447 3.069 1.00 0.00	
ATOM	113	CA	TRP	13	13.047 -22.901	
ATOM	114	CB.	TRP	13	14.370 -22.570 1.003 1.00 0.00	
ATOM	115	CG	TRP	13	15.606 -22.250 1.782 1.00 0.00	
ATOM	116		TRP	13	16.532 -21.419 1.278 1.00 0.00	
ATOM	117		TRP		17.575 -21.267 2.161 1.00 0.00	
ATOM	118	CE2	TRP	13	17.376 -22.018 3.298 1.00 0.00	

	707				(000)			700
АТОИ	707	CZO	TDD	12	10 142 22 100	4 460	1 00	708
ATOM	119	CZ2		13	18.142 -22.198			0.00 0.00
ATOM	120	CH2		13	17.667 -23.049		1.00	
ATOM	121	CZ3		13	16.437 -23.705		1.00	0.00
ATOM	122	CE3		13	15.678 -23.512		1.00	0.00
ATOM	123	CD2		13	16.122 -22.668		1.00	0.00
ATOM	124		TRP	13	12.729 -24.376		1.00	0.00
ATOM	125		TRP	13	11.727 -24.687		1.00	0.00
ATOM	126		GLU	14	13.541 -25.279		1.00	0.00
ATOM	127		GLU	14	13.321 -26.717		1.00	0.00
ATOM	128		GLU	14	14.174 -27.465			0.00
ATOM	129		GLU	14			1.00	0.00
ATOM	130	CD		14	16.218 -27.182		1.00	0.00
ATOM	131	0E1		14	16.439 -28.310		1.00	0.00
ATOM	132	0E2		14	16.368 -26.101		1.00	0.00
ATOM	133	C	GLU	14	11.842 -27.101		1.00	0.00
ATOM	134	0	GLU	14	11.366 -27.877	1.302	1.00	0.00
ATOM	135	N	GLU	15	11.104 - 26.552	3.099		0.00
ATOM	136	CA	GLU	15	9.686 -26.843	3.224	1.00	0.00
ATOM	137	CB	GLU	15	9.106 -26.243	4.512	1.00	0.00
ATOM	138	CG	GLU	15	9.759 -26.809	5.780	1.00	0.00
ATOM	139	CD	GLU	15	9.074 -26.248	7.021	1.00	0.00
ATOM	140	0E1	GLU	15	9.252 -25.035	7.268	1.00	0.00
ATOM	141	0E2	GLU	15	8.355 -27.018	7.695	1.00	0.00
ATOM	142	C	GLU	15	8.928 -26.358	1.981	1.00	0.00
ATOM	143	0	GLU	15	8.272 -27.159	1.319	1.00	0.00
ATOM	144	N	ASP	16	9.017 -25.063	1.654	1.00	0.00
ATOM	145	CA	ASP	16	8.346 -24.476	0.492	1.00	0.00
ATOM	146		ASP	16	8.646 -22.974	0.412	1.00	0.00
ATOM	147		ASP	16	8.014 -22.184	1.549	1.00	0.00
ATOM	148		ASP	16	6.932 -22.598	2.013	1.00	0.00
ATOM	149	0D2	ASP	16	8.582 -21.129	1.903	1.00	0.00
ATOM	150	С	ASP	16	8.768 -25.160	-0.811	1.00	0.00
ATOM	151	0	ASP	16	7.940 -25.685	-1.541	1.00	0.00
ATOM	152	N	LYS	17	10.066 -25.146	-1.096	1.00	0.00
ATOM	153	CA	LYS	17	10.753 -25.725	-2.232	1.00	0.00
ATOM	154	CB	LYS	17	12.269 -25.656	-1.916	1.00	0.00
ATOM	155	CG	LYS	17	13.125 -26.124		1.00	0.00
ATOM	156	CD	LYS	17	14.618 -26.153		1.00	0.00
ATOM	157	CE	LYS	17	14.986 -27.422		1.00	0.00
ATOM	158	NZ	LYS	17	16.353 -27.353		1.00	0.00
ATOM	159	C	LYS	17	10.249 -27.156		1.00	0.00
ATOM	160	0	LYS	17	9.771 -27.481		1.00	0.00
ATOM	161	N	ASN	18	10.352 -28.013		1.00	0.00
ATOM	162	CA	ASN	18	9.930 -29.404		1.00	0.00
ATOM	163	CB	ASN	18	10.453 -30.164		1.00	0.00
ATOM	164	CG	ASN	18 .	10.549 -31.672		1.00	0.00
ATOM	165		ASN	18	10.193 -32.210		1.00	0.00
ATOM	166		ASN	18	11.076 -32.357		1.00	0.00
ATOM	167	C	ASN	18	8.411 -29.516		1.00	0.00
ATOM	168	0	ASN	18	7.960 -30.305	-2.551	1.00	0.00

					(330)			171H1 C (
	709							710
ATOM	169	N	LEU	19	7.621 -28.720	-0.991	1.00	0.00
ATOM	170	CA	LEU	19	6.163 -28.693	-1.095	1.00	0.00
ATOM	171	CB	LEU	19	5.597 -27.630	-0.138	1.00	0.00
ATOM	172	CC	LEU	19	4.099 -27.339	-0.319	1.00	0.00
ATOM	173	CD1	LEU	19	3.278 -28.608	-0.086	1.00	0.00
ATOM	174	CD2	LEU	19	3.685 -26.226	0.651	1.00	0.00
ATOM	175	C	LEU	19	5.742 -28.407	-2.538	1.00	0.00
ATOM	176	0	LEU	19	4.953 -29.151	-3.115	1.00	0.00
ATOM	177	N	ARG	20	6.279 -27.327	-3.114	1.00	0.00
ATOM	178	CA	ARG	20	6.021 -26.885	-4.475	1.00	0.00
ATOM	179	CB	ARG	20	6.868 -25.639	-4.780	1.00	0.00
ATOM	180	CG	ARG	20	6.365 -24.428	-3.974	1.00	0.00
ATOM	181	CD	ARG	20	7.425 -23.335	-3.798	1.00	0.00
ATOM	182	NE	ARG	20	7.741 -22.659	-5.064	1.00	0.00
ATOM	183	CZ	ARG	20	8.449 -21.520	-5.159	1.00	0.00
ATOM	184		ARG	20	8.642 -20.954	-6.358	1.00	0.00
ATOM	185		ARG	20	8.960 -20.944	-4.062	1.00	0.00
ATOM	186	C	ARG	20	6.306 -28.041	-5.431	1.00	0.00
ATOM	187	0	ARG	20	5.481 -28.341	-6.296	1.00	0.00
ATOM	188	N	SER	21	7.457 -28.709	-5.263	1.00	0.00
ATOM	189	CA	SER	21	7.785 -29.852	-6.104	1.00	0.00
ATOM	190	СВ	SER	21	9.218 -30.346	-5.844	1.00	0.00
ATOM	191	OG	SER	21	9.296 -31.295	-4.800	1.00	0.00
ATOM	192	C	SER	21	6.714 -30.941	-5.940	1.00	0.00
ATOM	193	0	SER	21	6.243 -31.493	-6.931	1.00	0.00
ATOM	194	N	GLY	22	6.316 -31.235	-4.693	1.00	0.00
ATOM	195	CA	GLY	22	5.298 -32.216	-4.349	1.00	0.00
ATOM	196	С	GLY	22	3.994 -31.943	-5.092	1.00	0.00
ATOM	197	0	GLY	22	3.423 -32.855	-5.688	1.00	0.00
ATOM	198	N	VAL	23	3.532 -30.688	-5.069	1.00	0.00
ATOM	199	CA	VAL	23	2.313 -30.301	-5.758	1.00	0.00
ATOM	200	СВ	VAL	23	1.895 -28.864		1.00	0.00
ATOM	201		VAL	23	0.650 -28.489		1.00	0.00
ATOM	202		VAL	23	1.540 -28.749	-3.928	1.00	0.00
ATOM	203	C	VAL	23	2.478 -30.508		1.00	0.00
ATOM	204	0	VAL	23	1.573 -31.031	-7.900	1.00	0.00
ATOM	205	N	ARG	24	3.614 -30.125		1.00	0.00
ATOM	206	CA	ARG	24	3.798 -30.339		1.00	0.00
ATOM	207	СВ	ARG	24	5.037 -29.597		1.00	0.00
ATOM	208	CG	ARG	24	4.780 -28.084		1.00	0.00
ATOM	209	CD	ARG	24	5.882 -27.364		1.00	0.00
ATOM	210	NE	ARG	24	5.521 -25.958		1.00	0.00
ATOM	211	CZ	ARG	24	6.112 -25.145		1.00	0.00
ATOM	212		ARG	24	5.629 -23.911		1.00	0.00
ATOM	213		ARG	24	7.179 -25.559		1.00	0.00
ATOM	214	С	ARG	24	3.842 -31.835		1.00	0.00
ATOM	215	0	ARG	24	3.409 -32.224		1.00	0.00
ATOM	216	N	LYS		4.362 -32.672		1.00	0.00
ATOM	217	CA	LYS		4.476 -34.111		1.00	0.00
ATOM	218	CB	LYS		5.466 -34.694		1.00	

	711				,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,			712	
ATOM	219	CG	LYS	25	6.915 -34.293	-8.214	1.00	0.00	
ATOM	220	CD	LYS	25 25	7.765 -34.433	-6.946	1.00	0.00	
ATOM	221	CE	LYS	25 25	9.213 -34.002	-7.201	1.00	0.00	
					9.947 -33.814				
ATOM	222	NZ	LYS	25 25		-5.936	1.00	0.00	
ATOM	223	C	LYS	25 25	3.136 -34.846	-8.823	1.00	0.00	
ATOM	224	0	LYS	25	2.799 -35.621	-9.716	1.00	0.00	
ATOM	225	N	TYR	26	2.399 -34.649	-7.721	1.00	0.00	
ATOM	226	CA	TYR	26	1.152 -35.364	-7.442	1.00	0.00	
ATOM	227	CB	TYR	26	1.230 -35.951	-6.023	1.00	0.00	
ATOM	228	CC	TYR	26	2.595 -36.490	-5.622	1.00	0.00	
ATOM	229		TYR	26	3.226 -37.496	-6.376	1.00	0.00	
ATOM	230		TYR	26	4.493 -37.975	-5.993	1.00	0.00	
ATOM	231	CZ	TYR	26	5.132 -37.450	-4.854	1.00	0.00	
ATOM	232	OH	TYR	26	6.360 -37.908	-4.475	1.00	0.00	
ATOM	233		TYR	26	4.503 -36.446	-4.101	1.00	0.00	
ATOM	234		TYR	26	3.240 -35.970	-4.486	1.00	0.00	
ATOM	235	C	TYR	26	-0.132 -34.539	-7.598	1.00	0.00	
ATOM	236	0	TYR		-1.215 -35.121	-7.622	1.00	0.00	
ATOM	237	N	GLY	27	-0.031 -33.208	-7.690	1.00	0.00	
ATOM	238	CA	GLY	27	-1.166 -32.298	-7.815	1.00	0.00	
ATOM	239	C	GLY	27	-1.611 -31.807	-6.437	1.00	0.00	
ATOM	240	0	GLY	27	-1.307 -32.445	-5.427	1.00	0.00	
ATOM	241	N	GLU	28	-2.343 -30.684	-6.373	1.00	0.00	
ATOM	242	CA	GLU	28	-2.841 -30.180	-5.096	1.00	0.00	
ATOM	243	CB	GLU	28	-3.222 -28.688	-5.153	1.00	0.00	
ATOM	244	CG	GLU	28	-4.272 -28.258	-6.188	1.00	0.00	
ATOM	245	CD	GLU	28	-4.384 -26.729	-6.239	1.00	0.00	
ATOM	246	0E1	GLU	28	-3.430 -26.110	-6.760	1.00	0.00	
ATOM	247	0E2	CLU	28	-5.388 -26.178	-5.734	1.00	0.00	
ATOM	248	C	GLU	28	-3.931 -31.134	-4.593	1.00	0.00	
ATOM	249	0	GLU	28	-4.471 -31.927	-5.366	1.00	0.00	
ATOM	250	N	GLY	29	-4.223 -31.103	-3.292	1.00	0.00	
MOTA	251	CA	GLY	29	-5.189 -32.015	-2.695	1.00	0.00	
ATOM	252	C	GLY	29	-4.579 -33.403	-2.525		.0.00	
ATOM	253	0	GLY	29	-5.240 -34.417	-2.738	1.00	0.00	
ATOM	254	N	ASN	30	-3.304 -33.428	-2.127	1.00	0.00	
ATOM	255	CA	ASN	30	-2.513 -34.623	-1.872	1.00	0.00	
ATOM	256	CB	ASN	30	-1.753 -35.037	-3.146	1.00	0.00	
ATOM	257	CG	ASN	30	-2.659 -35.521	-4.275	1.00	0.00	
ATOM	258		ASN	30	-2.926 -36.717	-4.386	1.00	0.00	
ATOM	259		2 ASN	30	-3.099 -34.619	-5.148	1.00	0.00	
ATOM	260	C	ASN	30	-1.531 -34.286	-0.747	1.00	0.00	
ATOM	261	0	ASN	30	-0.394 -34.750	-0.758	1.00	0.00	
ATOM	262	N	TRP	31	-1.952 -33.460	0.218	1.00	0.00	
ATOM	263	CA	TRP	31	-1.109 -33.020	1.324	1.00	0.00	
ATOM	264	CB	TRP	31	-1.768 -31.874	2.099	1.00	0.00	
ATOM	265	CG	TRP	31	-2.506 -30.932	1.206	1.00	0.00	
ATOM	266		TRP	31	-3.849 -30.817	1.107	1.00	0.00	
ATOM	267		1 TRP	31	-4.165 -29.868	0.158	1.00	0.00	
ATOM	268	CE	2 TRP	31	-3.030 -29.322	-0.398	1.00	0.00	

					(338)			付用として
	713							714
ATOM	269	CZ2		31	-2.827 -28.345	-1.380	1.00	0.00
ATOM	270	CH2		31	-1.514 -28.010	-1.736	1.00	0.00
ATOM	271	CZ3		31	-0.429 -28.638	-1.111	1.00	0.00
ATOM	272	CE3	TRP	31	-0.643 -29.617	-0.127	1.00	0.00
ATOM	273	CD2	TRP	31	-1.951 -29.981	0.256	1.00	0.00
ATOM	274	C	TRP	31	-0.676 -34.192	2.199	1.00	0.00
ATOM	275	0	TRP	31	0.422 -34.164	2.748	1.00	0.00
ATOM	276	N	SER	32	-1.514 -35.229	2.299	1.00	0.00
ATOM	277	CA	SER	32	-1.216 -36.438	3.048	1.00	0.00
ATOM	278	CB	SER	32	-2.437 -37.367	3.005	1.00	0.00
ATOM	279	OG	SER	32	-2.894 -37.541	1.674	1.00	0.00
ATOM	280	С	SER	32	0.016 -37.098	2.424	1.00	0.00
ATOM	281	0	SER	32	1.041 -37.285	3.074	1.00	0.00
ATOM	282	N	LYS	33	-0.089 -37.434	1.137	1.00	0.00
ATOM	283	CA	LYS	33	0.982 -38.045	0.365	1.00	0.00
ATOM	284	CB	LYS	33	0.519 -38.218	-1.087	1.00	0.00
ATOM	285	CG	LYS	33	-0.578 -39.288	-1.199	1.00	0.00
ATOM	286	CD	LYS	33	-1.428 -39.119	-2.464	1.00	0.00
ATOM	287	CE	LYS	33	-0.590 -39.113	-3.749	1.00	0.00
ATOM	288	NZ	LYS	33	-1.444 -38.993	-4.946	1.00	0.00
ATOM	289	C	LYS	33	2.235 -37.172	0.452	1.00	0.00
ATOM	290	0	LYS	33	3.295 -37.649	0.854	1.00	0.00
ATOM	291	N	ILE	34	2.106 -35.892	0.087	1.00	0.00
ATOM	292	CA	ILE	34	3.193 -34.925	0.107	1.00	0.00
ATOM	293	CB	ILE	34	2.688 -33.531	-0.323	1.00	0.00
ATOM	294		ILE	34	3.734 -32.442	-0.055	1.00	0.00
ATOM	295		ILE	34	2.353 -33.537	-1.825	1.00	0.00
ATOM	296		ILE	34	1.628 -32.276	-2.306	1.00	0.00
ATOM	297	С	ILE	34	3.905 -34.920	1.462	1.00	0.00
ATOM	298	0	ILE	34	5.125 -35.018	1.480	1.00	0.00
ATOM	299	N	LEU	35	3.188 -34.811	2.588	1.00	0.00
ATOM	300	CA	LEU	35	3.830 -34.790	3.901	1.00	0.00
ATOM	301		LEU	35 35	2.929 -34.170	4.984	1.00	
ATOM	302		LEU	35	1.797 -35.028		1.00	
ATOM	303		LEU	35	2.276 -35.947		1.00	
ATOM	304		LEU	35	0.710 -34.104	6.141	1.00	
ATOM	305	C	LEU	35	4.455 -36.134	4.273	1.00	
ATOM	306	0	LEU	35	5.457 -36.159	4.985	1.00	
ATOM	307	N	LEU	-36	3.892 -37.253	3.798	1.00	
ATOM	308	CA	LEU	36	4.446 -38.569	4.095	1.00	
ATOM	309	CB	LEU	36	3.457 -39.677	3.703	1.00	
ATOM	310	CG	LEU	36	2.258 -39.768	4.664	1.00	
	311		LEU	36	1.120 -40.548	3.995	1.00	
ATOM ATOM	312		LEU!	36	2.634 -40.466	5.978	1.00	
ATOM		CDZ	LEU	36	5.787 -38.729	3.377	1.00	
ATOM	313 314	0	LEU	36	6.770 -39.142	3.991	1.00	
ATOM	314	N	HIS	30 37	5.829 -38.395	2.082	1.00	
	316	CA	HIS	37	7.037 -38.482		1.00	
ATOM		CB		37	6.693 -38.264			
ATOM	317		HIS				1.00	
ATOM	318	CG	HIS	37	5.681 -39.227	-0.773	1.00	0.00

					(359)				付用とし
	715								716
ATOM	319	ND1	HIS	37	5.831 -	40.604	-0.708	1.00	0.00
ATOM	320	CE1	HIS	37	4.756 -	41.150	-1.302	1.00	0.00
ATOM	321	NE2	HIS	37	3.896 -	40.238	-1.761	1.00	0.00
ATOM	322	CD2	HIS	37	4.488 -	39.025	-1.423	1.00	0.00
ATOM	323	С	HIS	37	8.058 -	37.434	1.722	1.00	0.00
ATOM	324	0	HIS	37	9.208 -	37.754	2.013	1.00	0.00
ATOM	325		TYR	38	7.618 -	36.175	1.745	1.00	0.00
ATOM	326		TYR	38	8.390 -	34.991	2.080	1.00	0.00
ATOM	327		TYR	38	8.177 -		0.960	1.00	0.00
ATOM	328		TYR	38	8.481 -		-0.430	1.00	0.00
ATOM	329	CD1		38	7.601 -		-1.499	1.00	0.00
ATOM	330	CE1		38	7.877 -		-2.781	1.00	0.00
ATOM	331		TYR	38	9.030 -		-2.998	1.00	0.00
ATOM	332		TYR	38	9.298 -		-4.240	1.00	0.00
ATOM	333	CE2		38	9.911 -		-1.937	1.00	0.00
ATOM	334	CD2		38	9.638 -		-0.658	1.00	0.00
ATOM	335		TYR	38	7.986 -		3.455	1.00	0.00
ATOM	336	0	TYR	38	7.141 -		3.584	1.00	0.00
ATOM	337	N	LYS	39	8.615 -		4.485	1.00	0.00
ATOM	338	CA	LYS	39	8.385 -		5.880	1.00	0.00
ATOM	339	CB	LYS	39		-35.762	6.741	1.00	0.00
ATOM	340	CG	LYS	39		-37.140	6.491	1.00	0.00
ATOM	341	CD	LYS	39	9.122 -		7.328	1.00	0.00
ATOM	342	CE	LYS	39	8.515 -		6.968	1.00	0.00
ATOM	343	NZ	LYS	39		-40.689	7.749	1.00	0.00
ATOM	344	C	LYS	. 39		-33.285	6.191	1.00	0.00
ATOM	345		LYS	39	10.066		6.054	1.00	0.00
ATOM	346	N	PHE	40	7.955		6.608	1.00	0.00
ATOM	347	CA	PHE	40		-31.015	6.947	1.00	0.00
ATOM	348	CB	PHE	40		-30.196	6.580	1.00	0.00
ATOM	349	CG	PHE	40		-30.377	5.132	1.00	0.00
ATOM	350		PHE	40		-31.112	4.781	1.00	0.00
ATOM	351	CE1		40		-31.272	3.426		
ATOM	352		PHE	40		-30.697		1.00	0.00
ATOM	353		PHE	40		-29.966	2.776	1.00	0.00
ATOM	354		PHE	40		-29.807	4.128	1.00	0.00
ATOM	355	C	PHE	40		-30.865	8.424	1.00	0.00
ATOM	356	0	PHE	40		-31.866	9.130	1.00	0.00
ATOM	357	N	ASN	41		-29.626	8.899	1.00	0.00
ATOM	358	CA	ASN	41		-29.390	10.284	1.00	0.00
ATOM	359	CB	ASN	41		-27.981	10.442	1.00	0.00
ATOM	360	CG	ASN	41	10.591		11.727	1.00	0.00
ATOM	361		ASN	41	11.270		12.152	1.00	0.00
ATOM	362		ASN	41	10.556		12.132	1.00	0.00
ATOM	363	C	ASN	41		-29.652	11.251	1.00	0.00
ATOM	364	0	ASN	41		-30.548	12.085	1.00	0.00
ATOM	365	N	ASN	42		-28.875	11.142	1.00	0.00
ATOM	366	CA	ASN	42		-29.000	11.990	1.00	0.00
ATOM	367	CB	ASN	42		-28.106	13.237	1.00	0.00
ATOM	368	CG	ASN	42		-28.459	14.125	1.00	0.00

					(300)				付用とし
	717								718
ATOM	369	OD1		42	6.985	-29.362	14.952	1.00	0.00
ATOM	370	ND2	ASN	42	8.174	-27.728	13.982	1.00	0.00
ATOM	371	C	ASN	42	4.513	-28.582	11.184	1.00	0.00
ATOM	372	0	ASN	42	3.735	-27.743	11.636	1.00	0.00
ATOM	373	N	ARG	43	4.349	-29.137	9.977	1.00	0.00
ATOM	374	CA	ARG	43	3.265	-28.786	9.065	1.00	0.00
ATOM	375	CB	ARG	43	3.857	-28.323	7.726	1.00	0.00
ATOM	376	CG	ARG	43	5.106	-27.441	7.858	1.00	0.00
ATOM	377	CD	ARG	43	4.918	-26.141	8.649	1.00	0.00
ATOM	378	NE	ARG	43	6.174	-25.387	8.607	1.00	0.00
ATOM	379	CZ	ARG	43	6.382	-24.136	9.044	1.00	0.00
ATOM	380	NH1	ARG	43	5.405	-23.391	9.583	1.00	0.00
ATOM	381	NH2	ARG	43	7.618	-23.641	8.938	1.00	0.00
ATOM	382	С	ARG	43	2.300	-29.953	8.838	1.00	0.00
ATOM	383	0	ARG	43	2.721	-31.052	8.482	1.00	0.00
ATOM	384	N	THR	44	1.004	-29.690	9.030	1.00	0.00
ATOM	385	CA	THR	44	-0.108	-30.612	8.850	1.00	0.00
ATOM	386	CB	THR	44		-30.300	9.928	1.00	0.00
ATOM	387		THR	44	-0.583	-30.468	11.340	1.00	0.00
ATOM	388	0G1	THR	44		-28.968	9.760	1.00	0.00
ATOM	389	C	THR	44		-30.374	7.473	1.00	0.00
ATOM	390	0	THR	44		-29.414	6.795	1.00	0.00
ATOM	391	N	SER	45		-31.212	7.068	1.00	0.00
ATOM	392	CA	SER	45		-31.038	5.805	1.00	0.00
ATOM	393	CB	SER	45		-32.106	5.652	1.00	0.00
ATOM	394	OG	SER	45		-33.379	5.512	1.00	0.00
ATOM	395	С	SER	45		-29.638	5.742	1.00	0.00
ATOM	396	0	SER	45		-29.009	4.686	1.00	0.00
ATOM	397	N	VAL	46		-29.148	6.890	1.00	0.00
ATOM	398	CA	VAL	46		-27.823	7.015	1.00	0.00
ATOM	399	CB	VAL	46		-27.644	8.410	1.00	0.00
ATOM	400		VAL	46		-26.231	8.567	1.00	0.00
ATOM	401		VAL	46		-28.651			0.00
ATOM	402	С	VAL	46		-26.793	6.736	1.00	0.00
ATOM	403	0	VAL	46		-25.973	5.835	1.00	0.00
ATOM	404	N	MET	47		-26.832	7.493	1.00	0.00
ATOM	405	CA	MET	47		-25.893	7.298	1.00	0.00
ATOM	406	CB	MET	47		-26.259	8.230	1.00	0.00
ATOM	407	CG	MET	47		-25.071	9.090	1.00	0.00
ATOM	408	SD	MET	47	-0.409	-24.528	10.323	1.00	0.00
ATOM	409	CE	MET	47		-25.883	11.517	1.00	0.00
ATOM	410	C	MET	47		-25.851	5.829	1.00	0.00
ATOM	411	0	MET	47		-24.778	5.265	1.00	0.00
ATOM	412	N	LEU	48		-27.029	5.215	1.00	0.00
ATOM	413	CA	LEU	48		-27.206	3.831	1.00	0.00
ATOM	414	CB	LEU	48		-28.706	3.534	1.00	0.00
ATOM	415	CG	LEU	48		-29.271	4.233	1.00	0.00
ATOM	416		LEU	48		-30.779	4.450	1.00	0.00
ATOM	417		LEU	· 48		-29.006	3.382	1.00	0.00
ATOM	418	C	LEU			-26.530	2.861	1.00	0.00
					_	=	-		

	719								720
ATOM	419	0	LEU	48	-0.341	-25.687	2.069	1.00	0.00
ATOM	420	N	LYS	49	-2.061	-26.883	2.913	1.00	0.00
ATOM	421	CA	LYS	49	-3.033	-26.272	2.016	1.00	0.00
ATOM	422	CB	LYS	49	-4.421	-26.924	2.098	1.00	0.00
ATOM	423	CG	LYS	49	-5.202	-26.719	3.407	1.00	0.00
ATOM	424	CD	LYS	49		-26.101	3.190	1.00	0.00
ATOM	425	CE	LYS	49		-24.568	3.230	1.00	0.00
ATOM	426	NZ	LYS	49		-24.055	4.596	1.00	0.00
ATOM	427	С	LYS	49		-24.758	2.207	1.00	0.00
ATOM	428	0	LYS	49		-24.035	1.233	1.00	0.00
ATOM	429	N	ASP	50		-24.271	3.444	1.00	0.00
ATOM	430	CA	ASP	50		-22.845	3.724	1.00	0.00
ATOM	431	СВ	ASP	50		-22.583	5.229	1.00	0.00
ATOM	432	CG	ASP	50		-22.733	5.697	1.00	0.00
ATOM	433		ASP	50		-23.759	6.336	1.00	0.00
ATOM	434		ASP	50		-21.846	5.337	1.00	0.00
ATOM	435	С	ASP	50		-22.159	3.085	1.00	0.00
ATOM	436	0	ASP	50		-21.130	2.437	1.00	0.00
ATOM	437	N	ARG	51	-0.533	-22.722	3.247	1.00	0.00
ATOM	438	CA	ARG	51		-22.151	2.655	1.00	0.00
ATOM	439	CB	ARG	51	1.893	-23.009	3.003	1.00	0.00
ATOM	440	CG	ARG	51	3.179	-22.191	3.172	1.00	0.00
ATOM	441	CD	ARG	51	3.517	-21.240	2.022	1.00	0.00
ATOM	442	NE	ARG	51	4.903	-20.765	2.157	1.00,	0.00
ATOM	443	CZ	ARG	51	5.328	-19.513	2.393	1.00	0.00
ATOM	444	NH1	ARG	51	6.640	-19.251	2.396	1.00	0.00
ATOM	445	NH2	ARG	51	4.464	-18.519	2.628	1.00	0.00
ATOM	446	C	ARG	51	0.473	-22.038	1.141	1.00	0.00
ATOM	447	0	ARG	51	0.692	-20.975	0.561	1.00	0.00
ATOM	448	N	TRP	52	0.037	-23.133	0.504	1.00	0.00
ATOM	449	CA	TRP	52	-0.216	-23.170	-0.927	1.00	0.00
ATOM	450	CB	TRP	52	-0.625	-24.586	-1.327	1.00	0.00
ATOM	451	CG	TRP	52	-0.797	-24.789	-2.798	1.00	0.00
ATOM	452	CD1	TRP	52	-1.968	-25.028	-3.427	1.00	0.00
ATOM	453	NE1	TRP	52	-1.753	-25.171	-4.780	1.00	0.00
ATOM	454		TRP	52	-0.418	-25.030	-5.091	1.00	0.00
ATOM	455	CZ2	TRP	52	0.293	-25.089	-6.298	1.00	0.00
ATOM	456		TRP	52		-24.910	-6.280	1.00	0.00
ATOM	457		TRP	52	2.342	-24.666	-5.064	1.00	0.00
ATOM	458		TRP	52		-24.603	-3.859	1.00	0.00
ATOM	459		TRP	52		-24.784	-3.841	1.00	0.00
ATOM	460	C	TRP	52		-22.153	-1.328	1.00	0.00
ATOM	461	0	TRP	52		-21.454	-2.331	1.00	0.00
ATOM	462	N.	ARG	53		-22.068	-0.540	1.00	0.00
ATOM	463	CA	ARG	53		-21.145	-0.771	1.00	0.00
ATOM	464	CB	ARG	53		-21.325	0.292	1.00	0.00
ATOM	465	CG	ARG	53		-20.406	0.028	1.00	0.00
ATOM	466	CD	ARG	53 52		-20.798	0.859	1.00	0.00
ATOM	467	NE	ARG	53 53		-20.697	2.311	1.00	0.00
ATOM	468	CZ	ARG	53	-1.121	-20.531	3.233	1.00	0.00

```
721
                                                                   722
ATOM
        469
             NH1 ARG
                         53
                                 -9.001 - 20.400
                                                   2.870 1.00 0.00
ATOM
        470
             NH2 ARG
                         53
                                 -7.413 - 20.506
                                                   4.533
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C
                  ARG
ATOM
        471
                         53
                                 -2.917 -19.724
                                                  -0.826
                                                          1.00
                                                                 0.00
        472 0
                  ARG
ATOM
                         53
                                 -3.182 -19.011
                                                  -1.792
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
                  THR
        473
             N
                         54
                                 -2.135 -19.333
                                                   0.189
                                                          1.00
                                                                 0.00
        474 CA
                 THR
ATOM
                         54
                                -1.495 -18.029
                                                   0.267
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 THR
ATOM
        475
             CB
                         54
                                 -0.603 -17.958
                                                   1.517 1.00
                                                                0.00
        476
             CG2 THR
ATOM
                         54
                                  0.006 - 16.567
                                                   1.704
                                                          1.00
                                                                0.00
             OG1 THR
ATOM
        477
                         54
                                 -1.378 -18.259
                                                   2.658
                                                          1.00
                                                                 0.00
        478
             C
                  THR
ATOM
                         54
                                 -0.699 -17.790
                                                  -1.021
                                                          1.00
                                                                 0.00
        479
             0
                  THR
ATOM
                         54
                                 -0.898 - 16.783
                                                  -1.698
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        480
             N
                  MET
                         55
                                  0.188 - 18.733
                                                  -1.356
                                                          1.00
                                                                 0.00
             \mathsf{C}\mathsf{A}
                  MET
                                                                 0.00
ATOM
        481
                         55
                                  1.039 -18.702
                                                  -2.535
                                                          1.00
             CB
                  MET
ATOM
        482
                         55
                                   1.752 -20.066
                                                  -2.663
                                                          1.00
                                                                 0.00
        483
             CG
                  MET
ATOM
                         55
                                   3.252 -19.917
                                                  -2.908
                                                          1.00
                                                                 0.00
        484
             SD
                  MET
ATOM
                         55
                                   3.686 -19.150
                                                  -4.482
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        485
             CE
                  MET
                         55
                                   5.474 -19.054
                                                  -4.262
                                                           1.00
                                                                 0.00
        486
             C
                  MET
                                   0.269 - 18.352
                                                  -3.816
ATOM
                         55
                                                          1.00
                                                                 0.00
             0
                  MET
ATOM
        487
                         55
                                   0.649 - 17.427
                                                  -4.533
                                                          1.00
                                                                 0.00
         488
             N
                  LYS
                         56
                                  -0.803 -19.094
                                                  -4.119
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
                  LYS
ATOM
             CA
                                                  -5.335
        489
                         56
                                  -1.584 -18.891
                                                          1.00
                                                                 0.00
             CB
                  LYS
ATOM
        490
                                                  -5.810
                         56
                                 -2.189 -20.225
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CG
                  LYS
ATOM
         491
                                  -3.370 -20.721
                                                  -4.963
                                                          1.00
                         56
                                                                 0.00
        492
              CD
                  LYS
ATOM
                         56
                                  -3.679 -22.186
                                                  -5.303
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CE
                  LYS
                                  -4.836 -22.756
ATOM
         493
                         56
                                                  -4.464
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             NZ
                  LYS
         494
                         56
                                  -6.053 -23.025
                                                  -5.259
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C
                  LYS
ATOM
         495
                         56
                                 -2.619 -17.761
                                                  -5.260
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             0 .
                  LYS
         496
                         56
                                 -3.278 -17.520
                                                  -6.270
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         497
             N
                  LYS
                                  -2.772 -17.048
                                                  -4.129
                                                                 0.00
                         57
                                                           1.00
ATOM
         498
              CA
                 LYS
                                  -3.713 -15.921
                                                  -4.049
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         57
ATOM
         499
              CB
                  LYS
                                  -3.553 -15.116
                                                  -2.748
                                                          1.00
                         57
                                                                 0.00
              CG
                 LYS
ATOM
         500
                         57
                                  -4.123 -15.772
                                                 -1.491
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         501
              CD
                  LYS
                         57
                                 -4.044 -14.836
                                                  -0.271
                                                           1.00
                                                                 0.00
             CE
                 LYS
ATOM
         502
                         57
                                  -2.647 -14.222
                                                  -0.075
                                                           1.00
                                                                 0.00
         503
              NZ
                  LYS
                                  -2.503 -13.529
                                                   1.218
ATOM
                         57
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         504
              C
                  LYS
                         57
                                  -3.422 -14.944
                                                  -5.190 1.00
                                                                 0.00
                  LYS
ATOM
         505
              0
                         57
                                  -4.323 -14.531
                                                  -5.918 1.00
                                                                 0.00
              N
                  LEU
ATOM
         506
                         58
                                  -2.140 -14.587
                                                  -5.324
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CA
                  LEU
ATOM
         507
                         58
                                  -1.644 -13.663
                                                  -6.331
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CB
                  LEU
                                  -0.385 -12.963
                                                  -5.789
ATOM
         508
                         58
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CG LEU
                          58
                                  -0.647 -12.203
                                                  -4.473
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         509
ATOM
         510
              CD1 LEU
                                  -0.061 -12.951
                                                  -3.268
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         58
ATOM
              CD2 LEU
                                                  -4.527
                                                                 0.00
         511
                         58
                                  -0.027 -10.801
                                                           1.00
ATOM
         512
              C
                  LEU
                          58
                                  -1.354 -14.374
                                                  -7.659
                                                           1.00
                                                                 0.00
              0
                  LEU
ATOM
         513
                          58
                                  -0.655 -13.820
                                                  -8.503
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         514
             N
                  LYS
                          59
                                  -1.878 -15.596 -7.851
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         515
              CA LYS
                          59
                                                  -9.047
                                                                 0.00
                                  -1.682 -16.407
                                                           1.00
ATOM
         516
              CB
                  LYS
                          59
                                  -2.442 -15.804 -10.243
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         517
              CG LYS
                          59
                                  -3.898 -15.418 -9.942
                                                           1.00
                                                                 0.00
         518 CD LYS
ATOM
                          59
                                  -4.753 -16.627 -9.535 1.00 0.00
```

```
723
                                                                  724
ATOM
        519 CE LYS
                                 -6.174 -16.215 -9.130 1.00 0.00
                         59
        520
             NZ
                 LYS
                         59
                                 -6.911 -15.573 -10.235
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
             C
                 LYS
                         59
ATOM
        521
                                 -0.188 - 16.572 - 9.336
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        522
             0
                 LYS
                                  0.231 -16.549 -10.491
                                                          1.00
                                                                0.00
                         59
ATOM
        523 N
                 LEU
                                  0.619 -16.729 -8.279
                                                          1.00
                                                                0.00
                         60
        524 CA
                 LEU
ATOM
                         60
                                  2.061 -16.853 -8.410
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        525
             CB
                 LEU
                         60
                                  2.724 -16.613 -7.049
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
             CG
                 LEU
                                  4.256 -16.456 -7.074
        526
                         60
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        527
             CD1 LEU
                         60
                                  4.761 -15.514 -8.177
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        528
             CD2 LEU
                                  4.716 -15.876 -5.730
                         60
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        529
             C
                 LEU
                                  2.465 -18.157 -9.105
                         60
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        530
             0
                 LEU
                                  3.509 -18.224 -9.751
                         60
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        531 N
                  ILE
                                  1.628 -19.195
                                                 -9.001
                         61
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        532 CA
                 ILE
                         61
                                  1.859 -20.483
                                                 -9.636
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        533
             CB ILE
                                  1.118 -21.588
                                                 -8.849
                         61
                                                          1.00
                                                               0.00
ATOM
             CG2 ILE
                                  1.494 -22.990
                                                 -9.360
        534
                         61
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        535
             CG1 ILE
                                  1.340 -21.502 -7.325
                                                          1.00
                                                                0.00
                         61
ATOM
        536
             CD1 ILE
                                  2.807 -21.583 -6.892
                                                          1.00
                         61
                                                                0.00
ATOM
        537
             C
                  ILE
                         61
                                  1.401 -20.384 -11.100
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        538
             0
                  ILE
                                  0.468 -21.074 -11.507
                                                          1.00
                                                                0.00
                         61
ATOM
                  SER
        539
             N
                         62
                                  2.042 -19.521 -11.900
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             CA
                  SER
        540
                         62
                                  1.712 -19.324 -13.310
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         541
             CB
                  SER
                         62
                                  0.458 -18.444 -13.467
                                                          1.00
                                                                0.00
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         542
             0G
                  SER
                         62
                                  -0.720 -19.144 -13.119
ATOM
         543
             C
                  SER
                         62
                                  2.915 -18.763 -14.078
                                                          1.00
                                                                0.00
             0
                  SER
ATOM
         544
                         62
                                  3.804 -19.522 -14.463
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         545
             N
                  SER
                         63
                                  2.936 -17.447 -14.320
                                                          1.00
                                                                0.00
             CA
                  SER
ATOM
         546
                         63
                                  3.963 -16.725 -15.063
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         547
             CB
                  SER
                                  3.672 -16.856 -16.564
                         63
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         548
             0G
                  SER
                         63
                                  3.436 -18.206 -16.919
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         549
             C
                  SER
                         63
                                  3.913 -15.264 -14.599
                                                          1.00
                                                                0.00
             0
                  SER
ATOM
         550
                         63
                                  2.917 -14.880 -13.985
                                                                0.00
                                                          1.00
ATOM
             N
                  ASP
         551
                         64
                                  4.951 -14.454 -14.861
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             CA
                  ASP
         552
                                  4.970 -13.058 -14.424
                                                          1.00
                                                                0.00
                         64
ATOM
         553
              CB
                  ASP
                         64
                                  5.135 -12.979 -12.893
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
              CG ASP
                                  5.252 -11.539 -12.400
                                                                0.00
         554
                         64
                                                          1.00
             OD1 ASP
ATOM
         555.
                         64
                                  4.391 -10.726 -12.799
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         556
              OD2 ASP
                         64
                                  6.201 -11.278 -11.629
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         557
              C
                  ASP
                                  6.035 -12.225 -15.148
                         64
                                                          1.00
                                                                0.00
                  ASP
ATOM
         558
              0
                         64
                                  5.702 -11.514 -16.094
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         559
              N
                  SER
                         65
                                  7.293 -12.297 -14.686
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
              CA
                  SER
         560
                         65
                                  8.460 -11.570 -15.183
                                                          1.00
                                                                0.00
                  SER
ATOM
         561
              CB
                         65
                                  9.707 -12.118 -14.480
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         562
              0G
                  SER
                         65
                                  9.549 -12.041 -13.078
                                                          1.00
                                                                0.00
             C
                  SER
ATOM
         563
                         65
                                  8.615 -11.681 -16.700
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         564
             0
                  SER
                         65
                                  9.314 -12.570 -17.183
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         565
              N
                  GLU
                         66
                                  7.955 -10.784 -17.445
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         566
              CA
                  GLU
                                  7.929 -10.777 -18.894
                         66
                                                          1.00
                                                                0.00
              CB
                  GLU
ATOM
         567
                         66
                                  9.289 -10.311 -19.439
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         568
             CG
                 GLU
                                  9.089 -9.454 -20.690 1.00 0.00
```

					(304)				付用とし
	725								726
ATOM	569	CD	GLU	66			-20.357	1.00	0.00
ATOM	570	0E1		66			-19.857	1.00	0.00
ATOM	571	0E2		66			-20.609	1.00	0.00
ATOM	572	C	GLU	66	7.465 -1			1.00	0.00
ATOM	573	0	GLU	66	7.998 -1	2.701	-20.345	1.00	0.00
ATOM	574	N	ASP	67	6.478 -1	2.708	-18.647	1.00	0.00
MOTA	575	CA	ASP	67	5.845 -1	4.011	-18.787	1.00	0.00
MOTA	576	CB	ASP	67	5.413 -1	4.309	-20.234	1.00	0.00
ATOM	577	CG	ASP	67	4.566 -1	5.574	-20.359	1.00	0.00
ATOM	578	OD1	ASP	67	4.616 -1	6.186	-21.449	1.00	0.00
ATOM	579	0D2	ASP	67	3.838 -1	15.887	-19.393	1.00	0.00
ATOM	580	C	${\sf ASP}$	67	6.739 -1	15.082	-18.153	1.00	0.00
ATOM	581	0T1	${\tt ASP}$	67	7.588 -1	15.635	-18.885	1.00	0.00
ATOM	582	0T2	${\tt ASP}$	67	6.734 - 1	15.133	-16.900	1.00	0.00
ATOM	583	05'	GUA	68	<b>-7.908</b> <i>-4</i>	10.032	11.447	1.00	0.00
ATOM	584	C5'	GUA	68	-7.577 -4	10.886	10.372	1.00	0.00
ATOM	585	C4'	GUA	68	-7.679 -4	10.132	9.044	1.00	0.00
ATOM	586	04'	GUA	68	-8.964 -3	39.567	8.886	1.00	0.00
ATOM	587	C1'	GUA	68	-8.876 -3	38.534	7.928	1.00	0.00
ATOM	588	N9	GUA	68	-10.035 -3	37.629	8.072	1.00	0.00
ATOM	589	С8	GUA	68	-10.533 -3	37.081	9.224	1.00	0.00
ATOM	590	N7	GUA	68	-11.628 -3	36.393	9.062	1.00	0.00
ATOM	591	C5	GUA	68	-11.866 -3	36.471	7.693	1.00	0.00
ATOM	592	С6	GUA	68	-12.922 -3		6.909	1.00	0.00
ATOM	593	06	GUA	68	-13.918 -3	35.313	7.299	1.00	0.00
ATOM	594	N1	GUA	68	-12.736 -3	36.134	5.548	1.00	0.00
ATOM	595	C2	GUA	68	-11.690 -3		5.003	1.00	0.00
ATOM	596	N2	GUA	68	-11.619 -3	36.950	3.675	1.00	0.00
ATOM	597	N3	GUA	68	-10.731 -3	37.423	5.742	1.00	0.00
ATOM	598	C4	GUA	68	-10.871 -3	37.191	7.074	1.00	0.00
ATOM	599	C3'	GUA	68	-6.695 -3	38.958	8.923	1.00	0.00
ATOM	600	C2'	GUA	68	-7.582 -3	37.853	8.332	1.00	0.00
ATOM	601	03'	GUA	68	-5.636 -3	39.374	8.070	1.00	0.00
ATOM	602	P	THY	69	<b>-4.399</b> -3	38.418	7.643	1.00	0.00
ATOM	603	0P1	THY	69	-3.390 -3	39.254	6.956	1.00	0.00
ATOM	604	0P2	THY	69	-4.009 -3	37.602	8.814	1.00	0.00
ATOM	605	05'	THY	69	-5.062 -3	37.446	6.544	1.00	0.00
ATOM	606	C5'	THY	69	-5.779 -3	37.977	5.444	1.00	0.00
ATOM	607	C4'	THY	69	-6.685 -	36.924	4.794	1.00	0.00
ATOM	608	04'	THY	69	-7.759 -	36.420	5.551	1.00	0.00
ATOM	609	C1'			-8.166 -		4.955	1.00	0.00
ATOM	610	N1	THY	69	-9.095 -	34.478	5.856	1.00	0.00
ATOM	611	C6	THY		-8.857 -		7.208	1.00	0.00
ATOM	612	C5	THY		-9.702 -		8.056	1.00	0.00
ATOM	613	<b>C7</b>	THY		-9.316 -		9.524	1.00	0.00
ATOM	614	C4	THY		-10.904 -		7.579	1.00	0.00
ATOM	615	04	THY		-11.725 -		8.272	1.00	0.00
ATOM	616	N3	THY		-11.088 -		6.210	1.00	0.00
ATOM	617	C2	THY		-10.232 -			1.00	0.00
ATOM	618	02	THY		-10.493 -			1.00	0.00

	727				(,				728
ATOM	619	C3'	THY	69	-5.935	-35.680	4.302	1.00	0.00
ATOM	620	C2'	THY	69		-34.532	4.821	1.00	0.00
ATOM	621	03'	THY	69		-35.698	2.891	1.00	0.00
ATOM	622	P	THY	70	-4.920		2.124	1.00	0.00
ATOM	623	0P1		70		-35.252	0.986	1.00	0.00
ATOM	624	0P2		70		-33.923	3.144	1.00	0.00
ATOM	625	05'	THY	70		-33.525	1.578	1.00	0.00
ATOM	626	C5'	THY	70		-33.856	0.599	1.00	0.00
ATOM	627	C4'	THY	70		-32.811	0.594	1.00	0.00
ATOM	628	04'	THY	70		-32.666	1.902	1.00	0.00
ATOM	629	C1'	THY	70		-31.433	1.969	1.00	0.00
ATOM	630	N1	THY	70		-31.023	3.381	1.00	0.00
ATOM	631	C6	THY	70		-31.155	4.284	1.00	0.00
ATOM	632	C5	THY	70		-30.828	5.589	1.00	0.00
ATOM	633	C7	THY	70		-31.023	6.479	1.00	0.00
ATOM	634	C4	THY	70		-30.328	6.086	1.00	0.00
ATOM	635	04	THY	70		-29.990	7.241	1.00	0.00
ATOM	636	N3	THY	70		-30.252	5.120	1.00	0.00
ATOM	637	C2	THY	70		-30.523	3.771	1.00	0.00
ATOM	638	02	THY	70		-30.292	2.980	1.00	0.00
ATOM	639	C3,	THY	70		-31.391	0.191	1.00	0.00
ATOM	640	C2'	THY	70		-30.486	1.231	1.00	0.00
ATOM	641	03'	THY	70		-31.102	-1.133	1.00	0.00
ATOM	642	P	ADE	71		-29.742	-1.896	1.00	0.00
ATOM	643		ADE	71		-29.324	-1.383	1.00	0.00
ATOM	644		ADE	71		-29.943	-3.346	1.00	0.00
ATOM	645	05'	ADE	71		-28.656	-1.384	1.00	0.00
ATOM	646	C5'	ADE	71		-28.541	-1.914	1.00	0.00
ATOM	647	C4'	ADE	71		-27.358	-1.235	1.00	0.00
ATOM	648	04'	ADE	71	-11.071	-27.684	0.108	1.00	0.00
ATOM	649	C1'	ADE	71	-10.730	-26.595	0.941	1.00	0.00
ATOM	650	N9	ADE	71	-10.584	-26.962	2.367	1.00	0.00
ATOM	651	C8	ADE	71	-9.509	-27.569	2.952	1.00	0.00
ATOM	652	N7	ADE	71	-9.530	-27.617	4.250	1.00	0.00
ATOM	653	C5	ADE	71	-10.737	-27.013	4.555	1.00	0.00
ATOM	654	C6	ADE	71	-11.349	-26.719	5.782	1.00	0.00
ATOM	655	N6	ADE	71	-10.761	-27.020	6.941	1.00	0.00
ATOM	656	N1	ADE	71	-12.534	-26.086	5.779	1.00	0.00
ATOM	657	C2	ADE	71	-13.085	-25.767	4.607	1.00	0.00
ATOM	658	N3	ADE	71	-12.597	-25.967	3.383	1.00	0.00
ATOM	659	C4	ADE	71	-11.400	-26.613	3.422	1.00	0.00
ATOM	660	C3'	ADE	71	-9.787	-26.128	-1.141	1.00	0.00
ATOM	661	C2'	ADE	71		-26.236	0.327	1.00	0.00
ATOM	662	03'	ADE	71		-24.965	-1.403	1.00	0.00
ATOM	663	P	GUA	72		-23.511	-1.634	1.00	0.00
ATOM	664	0P1		72		-23.235	-3.086	1.00	0.00
ATOM	665		GUA	72 53		-23.377	-0.791	1.00	0.00
ATOM	666	05'	GUA	72 72		-22.597	-0.985	1.00	0.00
ATOM	667	C5'	GUA	72		-22.657	-1.433	1.00	0.00
ATOM	668	C4'	GUA	72	-13.335	-22.256	-0.300	1.00	0.00

					(366)				特開2(
	729								730
ATOM	669	04'	GUA	72	-13.030	-23.015	0.865	1.00	0.00
ATOM	670	C1'	GUA	72	-12.737	-22.157	1.953	1.00	0.00
ATOM	671	N9	GUA	72	-11.685	-22.738	2.822	1.00	0.00
ATOM	672	C8	GUA	72	-10.450	-23.206	2.454	1.00	0.00
ATOM	673	N7	GUA	72	-9.695	-23.592	3.443	1.00	0.00
ATOM	674	C5	GUA	72	-10.496	-23.390	4.556	1.00	0.00
ATOM	675	C6	GUA	72	-10.217	-23.648	5.928	1.00	0.00
ATOM	676	06	GUA	72	-9.169	-24.087	6.401	1.00	0.00
ATOM	677	N1	GUA	72	-11.296	-23.355	6.754	1.00	0.00
ATOM	678	C2	GUA	72	-12.508	-22.865	6.305	1.00	0.00
ATOM	679	N2	GUA	72	-13.445	-22.588	7.211	1.00	0.00
ATOM	680	N3	GUA	72	-12.760		5.016	1.00	0.00
ATOM	681	C4	GUA	72	-11.721		4.190	1.00	0.00
ATOM	682	C3'	GUA	72	-13.199		0.100	1.00	0.00
ATOM	683	C2'	GUA	72	-12.228		1.268	1.00	0.00
ATOM	684	03'	GUA	72	-14.467		0.493	1.00	0.00
ATOM	685	P	GUA	73	-14.697		0.904	1.00	0.00
ATOM	686		GUA	73	-16.028		0.408	1.00	0.00
ATOM	687		GUA	73	-13.496		0.510	1.00	0.00
ATOM	688	05'	GUA	73		-18.788	2.514	1.00	0.00
ATOM	689	C5'	GUA	73		-19.326	3.194	1.00	0.00
ATOM	690	C4'	GUA	73		-19.217	4.711	1.00	0.00
ATOM	691	04'	GUA	73		-19.895	5.107	1.00	0.00
ATOM	692	C1'	GUA	73		-19.140	6.093	1.00	0.00
ATOM	693	N9	GUA	73		-19.489	6.089	1.00	0.00
ATOM	694	C8	GUA	73		-19.554	5.013	1.00	0.00
ATOM	695	N7	GUA	73		-19.996	5.285	1.00	0.00
ATOM	696	C5	GUA	73		-20.234	6.651	1.00	0.00
ATOM	697	C6	GUA	73		-20.766	7.515	1.00	0.00
ATOM	698	06	GUA	73		-21.093	7.209	1.00	0.00
ATOM	699	N1	GUA	73		-20.897	8.825	1.00	0.00
ATOM	700	C2	GUA	73		-20.555	9.259	1.00	0.00
ATOM	701	N2	GUA	73		-20.686			
ATOM	702	N3	GUA	73		-20.060	8.445	1.00	0.00
ATOM	703	C4	GUA	73		-19.924	7.157	1.00	0.00
ATOM	704	C3'	GUA	73		-17.766	5.202	1.00	0.00
ATOM	705	C2'	GUA	73		-17.714	5.606	1.00	0.00
ATOM	706	03'	GUA	73		-17.562	6.291	1.00	0.00
ATOM	707	P	GUA	74		-16.131	7.021	1.00	0.00
ATOM	708		GUA	74		-16.040	7.540	1.00	0.00
ATOM	709		GUA	74		-15.073	6.128	1.00	0.00
ATOM	710	05'	GUA	74		-16.273	8.275	1.00	0.00
ATOM	711	C5'	GUA	74		-17.150	9.345	1.00	0.00
ATOM	712	C4'	GUA	74		-17.192	10.348	1.00	0.00
ATOM	713	04'	GUA	74		-17.612	9.706	1.00	0.00
ATOM	714	C1'		74		-17.030	10.370	1.00	0.00
ATOM	715	N9	GUA	74		-17.076	9.489	1.00	0.00
ATOM	716	C8	GUA	74		-16.711	8.168	1.00	0.00
ATOM	717	N7	GUA	74		-16.974	7.609	1.00	0.00
ATOM	718	C5	GUA	74		-17.551	8.632	1.00	0.00
VIAN	110	UJ	GUA	14	3.433	11.331	0.032	1.00	0.00

```
731
                                                                   732
                                                   8.613 1.00 0.00
ATOM
        719 C6 GUA
                         74
                                 -7.974 -18.093
                                                          1.00
ATOM
        720
             06
                 GUA
                         74
                                 -7.213 -18.184
                                                   7.653
                                                                 0.00
ATOM
        721
             N1
                  GUA
                         74
                                 -7.578 -18.583
                                                   9.851
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        722
             C2
                 GUA
                         74
                                 -8.377 -18.594
                                                  10.975
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        723
             N2
                  GUA
                         74
                                 -7.843 -19.055
                                                  12.108
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        724 N3
                  GUA
                         74
                                 -9.628 -18.111
                                                  10.990
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C4
                  GUA
                                 -10.029 -17.606
                                                   9.792 1.00
ATOM
        725
                         74
                                                                 0.00
             C3'
                 GUA
                                 -14.412 -15.831
                                                  10.988
ATOM
        726
                         74
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        727
             C2'
                  GUA
                         74
                                -12.955 -15.606
                                                  10.572
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        728
             03'
                  GUA
                                 -14.601 -15.943
                                                  12.391
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         74
ATOM
        729
             P
                  THY
                         75
                                 -14.351 -14.716
                                                  13.415
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        730
             OP1 THY
                         75
                                 -15.266 -14.879
                                                  14.566
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OP2 THY
                                                                 0.00
ATOM
        731
                         75
                                 -14.340 -13.448
                                                  12.652
                                                           1.00
             05'
ATOM
        732
                 THY
                         75
                                 -12.852 -15.020
                                                  13.918
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C5'
ATOM
        733
                 THY
                         75
                                 -12.572 -16.184
                                                  14.672
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        734
             C4'
                 THY
                         75
                                 -11.064 -16.368
                                                  14.836
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        735
             04'
                  THY
                         75
                                 -10.424 -16.342
                                                  13.574
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
        736
             C1'
                         75
                                  -9.101 -15.897
                                                  13.767
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        737
              N1
                  THY
                         75
                                  -8.489 -15.476
                                                  12.477
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         738
              С6
                  THY
                         75
                                  -9.224 -14.767
                                                  11.554
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        739
              C5
                  THY
                         75
                                  -8.732 -14.511
                                                   10.315
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        740
              C7
                  THY
                         75
                                  -9.626 -13.724
                                                    9.375
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        741
              C4
                  THY
                         75
                                  -7.420 -14.974
                                                    9.909
                                                           1.00
                                                                 0.00
              04
                  THY
                          75
                                  -6.927 -14.856
                                                                 0.00
ATOM
        742
                                                    8.790
                                                           1.00
ATOM
        743
              N3
                  THY
                          75
                                  -6.720 -15.622
                                                   10.911
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C2
                  THY
ATOM
        744
                         75
                                  -7.187 -15.891
                                                   12.190
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         745
              02
                  THY
                          75
                                  -6.466 -16.469
                                                  12.999
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C3'
                 THY
ATOM
         746
                          75
                                 -10.381 -15.277
                                                  15.680
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C2' THY
                                  -9.328 -14.724
ATOM
         747
                         75
                                                  14.713
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         748
              03'
                  THY
                                  -9.821 -15.893
                                                  16.828
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         75
ATOM
         749
              P
                  THY
                                  -9.016 -15.079
                                                  17.970
                                                           1.00
                          76
                                                                 0.00
              OP1 THY
ATOM
         750
                          76
                                  -9.106 -13.628
                                                  17.687
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         751
              OP2 THY
                          76
                                  -9.429 -15.603
                                                   19.291
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         752
              05' THY
                                  -7.501 -15.549
                                                   17.694
                                                           1.00
                                                                 0.00
                          76
ATOM
         753
              C5'
                  THY
                                  -7.125 -16.906
                                                   17.843
                                                           1.00
                          76
                                                                  0.00
ATOM
         754
              C4'
                  THY
                          76
                                  -5.682 -17.125
                                                   17.379
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         755
              04'
                  THY
                          76
                                  -5.538 -16.620
                                                   16.065
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
         756
              C1'
                          76
                                  -4.392 -15.804
                                                   15.978
                                                           1.00
                                                                 0.00
              N1
                  THY
ATOM
         757
                          76
                                  -4.590 -14.813
                                                   14.884
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         758
              60
                  THY
                          76
                                  -5.618 -13.898
                                                   14.943
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         759
              C5
                  THY
                          76
                                  -5.942 -13.133
                                                  13.870
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         760
              C7
                  THY
                          76
                                  -7.063 -12.124
                                                   14.042
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C4
                  THY
ATOM
         761
                          76
                                  -5.246 -13.268
                                                   12.610
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         762
              04
                  THY
                          76
                                  -5.526 -12.671
                                                   11.574
                                                           1.00
                                                                  0.00
              N3
                  THY
ATOM
         763
                          76
                                  -4.200 -14.172
                                                  12.638
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C2
                  THY
                                  -3.814 -14.934
                                                   13.730
                                                                  0.00
ATOM
         764
                          76
                                                           1.00
ATOM
         765
              02
                  THY
                          76
                                  -2.827 -15.664
                                                   13.653
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C3'
                  THY
                                                   18.240
                                                                  0.00
ATOM
         766
                          76
                                  -4.634 -16.402
                                                           1.00
                                                   17.376
ATOM
         767
              C2'
                  THY
                          76
                                  -4.281 -15.193
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         768
              03' THY
                          76
                                  -3.530 -17.275 18.425 1.00
                                                                 0.00
```

					(308)				特用とし
	733								734
ATOM	769	P	ADE	77	-2.373 -16	6.993	19.513	1.00	0.00
ATOM	770	0P1	ADE	77	-1.801 -18	8.317	19.856	1.00	0.00
MOTA	771	0P2	ADE	77	-2.926 -16	6.144	20.587	1.00	0.00
ATOM	772	05'	ADE	77	-1.272 -16	6.143	18.695	1.00	0.00
ATOM	773	C5'	ADE	77	-0.251 -16	6.780	17.953	1.00	0.00
ATOM	774	C4'	ADE	77	0.460 -19	5.796	17.018	1.00	0.00
ATOM	775	04'	ADE	77	-0.451 -15	5.205	16.118	1.00	0.00
ATOM	776	C1'	ADE	77	0.206 -14	4.100	15.543	1.00	0.00
ATOM	777	N9	ADE	77	-0.771 -13		14.879	1.00	0.00
ATOM	778	C8	ADE	77	-1.960 -12		15.373	1.00	0.00
ATOM	779	N7	ADE	77	-2.672 -17		14.509	1.00	0.00
ATOM	780	C5	ADE	77	-1.885 -13		13.364	1.00	0.00
ATOM	781	C6	ADE	77	-2.072 -1		12.069	1.00	0.00
ATOM	782	N6	ADE	77	-3.184 -10		11.718	1.00	0.00
ATOM	783	N1	ADE	77	-1.082 -1		11.168	1.00	0.00
ATOM	784	C2	ADE	77	0.032 -13		11.530	1.00	0.00
ATOM	785	N3	ADE	77	0.307 -13		12.694	1.00	0.00
ATOM	786	C4	ADE	77	-0.706 -1		13.587	1.00	0.00
ATOM	787	C3'	ADE	77	1.169 -1		17.700	1.00	0.00
ATOM	788	C2'	ADE	77	0.859 -13		16.757	1.00	0.00
ATOM	789	03'	ADE	77	2.556 -1		17.799	1.00	0.00
ATOM	790	P	GUA	78	3.608 -1		18.529	1.00	0.00
ATOM	791		GUA	78	4.762 -1		18.967	1.00	0.00
ATOM	792		GUA		2.875 -1				
		05'	GUA	78. 70			19.528	1.00	0.00
ATOM	793			78	4.093 -1		17.336		0.00
ATOM	794	C5'	GUA	78 ·	4.935 -1		16.294	1.00	0.00
ATOM	795	C4'	GUA	78 70	5.075 -1		15.167	1.00	0.00
ATOM	796	04'	GUA	78 70	3.794 -1 3.673 -1		14.615	1.00	0.00
ATOM	797	C1'	GUA	78 79			14.401	1.00	0.00
ATOM	798	N9	GUA	78 79	2.254 -1		14.319	1.00	0.00
ATOM	799	C8	GUA	78 70	1.312 -1		15.317	1.00	0.00
ATOM	800	N7	GUA	78 70		9.782	14.944	1.00	0.00
ATOM	801	C5	GUA	78 70	0.337 -		13.600		
ATOM	802	C6	GUA	78 70		8.898	12.659	1.00	0.00
ATOM	803	06	GUA	78 70		8.527	12.842	1.00	0.00
ATOM	804	N1	GUA	78 70		8.768	11.396	1.00	0.00
ATOM	805	C2	GUA	78 70		9.160	11.064	1.00	0.00
ATOM	806	N2	GUA	78 70		8.945	9.809	1.00	0.00
ATOM	807	N3	GUA	78 70		9.695	11.947	1.00	0.00
ATOM	808	C4	GUA	78 70		9.823	13.198	1.00	0.00
ATOM	809	C3'	GUA	78	5.648 -1		15.613	1.00	0.00
ATOM	810	C2'	GUA	78	4.381 -1		15.634	1.00	0.00
ATOM	811	03'	GUA	78	6.578 -1		14.644	1.00	0.00
ATOM	812	P	GUA			9.220	14.883	1.00	0.00
ATOM	813		GUA			-9.632	14.779	1.00	0.00
ATOM	814		GUA			-8.522	16.101	1.00	0.00
ATOM	815		GUA			-8.286	13.610	1.00	0.00
ATOM	816	C5'	GUA			8.526	12.343	1.00	0.00
ATOM	817	C4'	GUA			-7.637	11.243	1.00	0.00
ATOM	818	04'	GUA	79	5.722 -	-7.783	11.240	1.00	0.00

	735								736
ATOM	819	C1'	GUA	79	5.100	-6.515	11.311	1.00	0.00
ATOM	820	N9	GUA	79	3.837	-6.600	12.072	1.00	0.00
ATOM	821	68	GUA	79	3.655	-7.057	13.352	1.00	0.00
ATOM	822	N7	GUA	79	2.443	-6.909	13.806	1.00	0.00
ATOM	823	C5	GUA	79	1.765	-6.317	12.747	1.00	0.00
ATOM	824	C6	GUA	79	0.410	-5.883	12.655	1.00	0.00
ATOM	825	06	GUA	79	-0.467	-5.958	13.509	1.00	0.00
ATOM	826	N1	GUA	79	0.117	-5.302	11.427	1.00	0.00
ATOM	827	C2	GUA	79 .	1.026	-5.147	10.402	1.00	0.00
ATOM	828	N2	GUA	79	0.639	-4.451	9.331	1.00	0.00
ATOM	829	N3	GUA	79	2.294	-5.574	10.478	1.00	0.00
ATOM	830	C4	GUA	79	2.604	-6.141	11.674	1.00	0.00
ATOM	831	C3,	GUA	79	7.416	-6.133	11.402	1.00	0.00
ATOM	832	C2'	GUA	79	6.121	-5.653	12.048	1.00	0.00
ATOM	833	03'	GUA	79	7.633	-5.563	10.117	1.00	0.00
ATOM	834	P	GUA	80	8.074	-4.021	9.909	1.00	0.00
ATOM	835	0P1		80	8.669	-3.888	8.560	1.00	0.00
ATOM	836		GUA	80	8.846	-3.585	11.093	1.00	0.00
ATOM	837	05'	GUA	80	6.665	-3.236	9.912	1.00	0.00
ATOM	838	C5'	GUA	80	5.789	-3.293	8.801	1.00	0.00
ATOM	839	C4'	GUA	80	4.502	-2.508	9.080	1.00	0.00
ATOM	840	04'	GUA	80	3.753	-3.102	10.127	1.00	0.00
ATOM	841	C1'	GUA	80	3.733	-2.085	10.760	1.00	0.00
ATOM	842	N9	GUA	80	2.431	-2.528	12.046	1.00	0.00
ATOM	843	C8	GUA	80	3.063	-3.126	13.105	1.00	0.00
ATOM	844	N7	GUA	80	2.274	-3.394	14.111	1.00	0.00
ATOM	845	C5	GUA	80	1.020	-2.963	13.686	1.00	0.00
ATOM	846	C6	GUA	80	-0.261	-3.047	14.322	1.00	0.00
ATOM	847	06	GUA	80	-0.540	-3.500	15.431	1.00	0.00
ATOM	848	N1	GUA	80	-1.286	-2.545	13.526	1.00	0.00
ATOM	849	C2	GUA	80	-1.107	-2.016	12.265	1.00	0.00
ATOM	850	N2	GUA	80	-2.185	-1.541	11.635	1.00	0.00
ATOM	851	N3	GUA	80	0.090	-1.939	11.662	1.00	0.00
ATOM	852	C4	GUA	80	1.108	-2.436	12.418	1.00	0.00
ATOM	853	C3'	GUA	80	4.745	-1.062	9.547	1.00	0.00
ATOM	854	C2'	GUA	80	4.109	-1.042	10.940	1.00	0.00
ATOM	855	03'	GUA	80	4.076	-0.148	8.700	1.00	0.00
ATOM	856	05'	CYT	81	-11.013	-2.058	15.199	1.00	0.00
ATOM	857	C5'	CYT	81	-10.755	-0.901	14.430	1.00	0.00
ATOM	858	C4'	CYT	81	-9.448	-1.029	13.639	1.00	0.00
ATOM	859	04'	CYT	81	-8.356	-1.336	14.481	1.00	0.00
ATOM	860	C1'	CYT	81	-7.310	-1.764	13.637	1.00	0.00
ATOM	861	N1	CYT	81	-6.237	-2.470	14.383	1.00	0.00
ATOM	862	C6	CYT	81	-6.558	-3.412	15.328	1.00	0.00
ATOM	863	C5	CYT	81	-5.604	-4.136	15.957	1.00	0.00
ATOM	864	C4	CYT	81	-4.238	-3.861	15.606	1.00	0.00
ATOM	865	N4	CYT	81	-3.240	-4.524	16.192	1.00	0.00
ATOM	866	N3	CYT	81	-3.931	-2.956	14.667	1.00	0.00
ATOM	867	C2	CYT	81	-4.905	-2.253	14.024	1.00	0.00
ATOM	868	02	CYT	81	-4.598	-1.458	13.139	1.00	0.00

	707				(010)				יש מוניו
	737	001	01 m						738
ATOM	869	C3'	CYT	81	-9.447	-2.156	12.596	1.00	0.00
ATOM	. 870	C2'	CYT	81	-8.031	-2.724	12.701	1.00	0.00
ATOM	871	03'	CYT	81	-9.746	-1.626	11.315	1.00	0.00
ATOM	872	P	CYT	82	-9.890	-2.565	10.006	1.00	0.00
ATOM	873	0P1	CYT	82	-10.179	-3.943	10.461	1.00	0.00
ATOM	874	0P2	CYT	82	-10.815	-1.893	9.066	1.00	0.00
ATOM	875	05'	CYT	82	-8.409	-2.551	9.360	1.00	0.00
ATOM	876	C5'	CYT	82	-7.897	-1.401	8.708	1.00	0.00
ATOM	877	C4'	CYT	82	-6.515	-1.677	8.100	1.00	0.00
ATOM	878	04'	CYT	82	-5.584	-2.000	9.113	1.00	0.00
ATOM	879	C1'	CYT	82	-4.743	-3.056	8.694	1.00	0.00
ATOM	880	N1	CYT	82	-4.357	-3.831	9.897	1.00	0.00
ATOM	881	C6	CYT	82	-5.338	-4.216	10.768	1.00	0.00
ATOM	882	C5	CYT	82	-5.068	-4.898	11.894	1.00	0.00
ATOM	883	C4	CYT	82	-3.688	-5.204	12.149	1.00	0.00
ATOM	884	N4	CYT	82	-3.347	-5.912	13.226	1.00	0.00
ATOM	885	N3	CYT	82	-2.728	-4.844	11.283	1.00	0.00
ATOM	886	C2	CYT	82	-3.026	-4.164	10.138	1.00	0.00
ATOM	887	02	CYT	82	-2.134	-3.865	9.347	1.00	0.00
ATOM	888	C3,	CYT	82	-6.517	-2.856	7.116	1.00	0.00
ATOM	889	C2'	CYT	82	-5.653	-3.902	7.808	1.00	0.00
ATOM	890	03'	CYT	82	-5.984	-2.413	5.876	1.00	0.00
ATOM	891	P	CYT	83	-5.949	-3.348	4.560	1.00	0.00
ATOM	892		CYT	83	-5.889	-2.468	3.372	1.00	0.00
	893		CYT						
ATOM				83	-7.023	-4.358	4.677	1.00	0.00
ATOM	894	05'	CYT	83	-4.535	-4.104	4.705	1.00	0.00
ATOM	895	C5'	CYT	83	-3.316	-3.504	4.303	1.00	0.00
ATOM	896	C4'	CYT	83	-2.147	-4.432	4.658	1.00	0.00
ATOM	897	04'	CYT	83	-2.122	-4.659	6.054	1.00	0.00
ATOM	898	C1'	CYT	83	-1.408	-5.849	6.333	1.00	0.00
ATOM	899	N1	CYT	83	-2.046	-6.546	7.477	1.00	0.00
ATOM	900	C6	CYT	83	-3.409	-6.648	7.518	1.00	0.00
ATOM	901	C5	CYT	83	-4.052		8.602	1.00	0.00
ATOM	902	C4	CYT	83	-3.230	-7.579	9.690	1.00	0.00
ATOM	903	N4	CYT	83	-3.784	-8.045	10.810	1.00	0.00
ATOM	904	N3	CYT	83	-1.894	-7.602	9.585	1.00	0.00
ATOM	905	C2	CYT	83	-1.266	-7.116	8.478	1.00	0.00
ATOM	906	02	CYT	83	-0.045	-7.212	8.371	1.00	0.00
ATOM	907	C3'	CYT	83	-2.303	-5.832	4.059	1.00	0.00
ATOM	908	C2'	CYT	83	-1.556	-6.696	5.071	1.00	0.00
ATOM	909	03'	CYT	83	-1.742	-5.919	2.759	1.00	0.00
ATOM	910	P	THY	84	-1.975	-7.210	1.810	1.00	0.00
ATOM	911		THY	84	-3.400	-7.601	1.885	1.00	0.00
ATOM	912		THY	84	-1.364	-6.932	0.492	1.00	0.00
ATOM	913	05'	THY	84	-1.119	-8.380	2.512	1.00	0.00
ATOM	914	C5'	THY	84	0.296	-8.395	2.476	1.00	0.00
ATOM	915	C4'	THY	84	0.795	-9.539	3.364	1.00	0.00
ATOM	916	04'	THY	84	0.192	-9.440	4.640	1.00	0.00
ATOM	917	C1'	THY	84	0.050	-10.724	5.201	1.00	0.00
ATOM	918	N1	THY	84	-1.039	-10.693	6.216	1.00	0.00

739 740 919 C6 THY 5.870 1.00 0.00 ATOM 84 -2.278 -10.205 C5 THY 1.00 0.00 ATOM 920 84 -3.288 -10.145 6.770 THY -4.609 -9.611 0.00 ATOM 921 C7 84 6.246 1.00 **C4** THY -3.106 -10.575 1.00 0.00 ATOM 922 84 8.139 923 04 THY -3.971 -10.560 9.010 1.00 0.00 ATOM 84 N3 THY -1.825 -11.024 1.00 ATOM 924 84 8.425 0.00C2THY -0.781 -11.132 1.00 0.00 ATOM 925 84 7.516 02 **ATOM** THY 0.297 - 11.6031.00 0.00 926 84 7.867 ATOM 927 C3' THY 0.405 - 10.9202.817 1.00 0.00 84 C2' THY ATOM 928 -0.330 -11.578 3.991 1.00 0.00 84 03' THY ATOM 929 84 1.573 -11.610 2.403 1.00 0.00 Ρ. ADE **ATOM** 930 1.529 -13.108 1.801 1.00 0.00 85 OP1 ADE 1.00 ATOM 931 85 0.164 - 13.3661.286 0.00 ATOM 932 OP2 ADE 2.703 ~13.311 0.926 1.00 0.00 85 ATOM 05' ADE 933 85 1.735 -13.991 1.00 0.00 3.127 C5' ADE 3.914 ATOM 934 85 2.903 -13.854 1.00 0.00 C4' ADE ATOM 935 85 2.713 -14.603 5.232 1.00 0.00 04' ADE ATOM 936 85 1.565 -14.120 5.907 1.00 0.00 **ATOM** 937 C1' ADE 85 0.964 -15.187 6.606 1.00 0.00 **ATOM** N9 ADE 938 85 -0.441 -14.837 6.911 1.00 0.00 ATOM 68 ADE 939 85 -1.420 -14.414 6.046 1.00 0.00 ATOM N7 ADE -2.527 -14.037 940 85 6.622 1.00 0.00 C5 ADE -2.272 -14.245 0.00 ATOM 941 85 7.972 1.00 ATOM 942 C6 ADE 85 -3.038 -14.036 9.133 1.00 0.00 ATOM 943 N6 ADE -4.280 -13.549 9.100 1.00 0.00 85 N1 ADE ATOM 944 85 -2.506 -14.366 10.322 1.00 0.00 ATOM C2 ADE 10.359 945 85 -1.277 -14.870 1.00 0.00 0.00 ATOM 946 N3 ADE -0.447 -15.104 9.349 1.00 85 ATOM 947 C4 ADE -1.011 -14.757 8.160 1.00 0.00 85 ATOM 948 C3' ADE 85 2.478 -16.105 5.021 1.00 0.00 C2' ADE ATOM 949 85 1.071 -16.314 5.587 1.00 0.00 **ATOM** 950 03' ADE 85 3.481 -16.810 5.722 1.00 0.00 ATOM 951 P ADE 3.587 -18.415 5.703 86 1.00 0.00 OP1 ADE ATOM 952 2.732 -18.934 86 4.608 1.00 0.00 ATOM 953 OP2 ADE 86 5.025 -18.764 5.737 1.00 0.00 05' ADE 2.922 -18.803 0.00 ATOM 954 86 7.113 1.00 ATOM 955 C5' ADE 3.522 - 18.3711.00 0.00 86 8.316 ADE ATOM 956 C4' 86 2.683 -18.766 9.526 1.00 0.00 ATOM 957 04' ADE 86 1.407 -18.155 9.478 1.00 0.00 ATOM 958 C1' ADE 86 0.393 - 19.1169.686 1.00 0.00 N9 ATOM 959 ADE 86 -0.823 -18.665 8.974 1.00 0.00 ATOM С8 ADE -1.026 -18.579 960 86 7.619 1.00 0.00 ATOM 961 N7 ADE 86 -2.150 -18.016 7.273 1.00 0.00 ATOM 962 C5 ADE 86 -2.746 -17.715 8.491 1.00 0.00 ATOM 963 C6 ADE 86 -3.970 -17.107 8.829 1.00 0.00 ATOM 964 N6 ADE 86 -4.810 -16.632 7.908 1.00 0.00 ATOM N1 ADE -4.286 -16.975 10.129 0.00 965 86 1.00 ATOM C2 ADE -3.420 -17.39711.045 0.00 966 86 1.00 -2.217 -17.938 10.864 ATOM 967 N3 ADE 86 1.00 0.00 ATOM 968 C4 ADE 86 -1.943 -18.095 9.537 1.00 0.00

					(312)				特開と
	741								742
ATOM	969	C3,	ADE	86	2.441	-20.274	9.629	1.00	0.00
ATOM	970	C2'	ADE	86	1.001	-20.408	9.142	1.00	0.00
ATOM	971	03'	ADE	86	2.631	-20.614	10.987	1.00	0.00
ATOM	972	P	CYT	87	2.669	-22.131	11.513	1.00	0.00
ATOM	973	0P1	CYT	87	2.832	-23.048	10.357	1.00	0.00
ATOM	974	0P2	CYT	87	3.638	-22.173	12.627	1.00	0.00
ATOM	975	05'	CYT	87	1.182	-22.254	12.124	1.00	0.00
ATOM	976	C5'	CYT	87	0.847	-21.574	13.322	1.00	0.00
ATOM	977	C4'	CYT	87		-21.428	13.498	1.00	0.00
ATOM	978	04'	CYT	87	-1.251	-20.836	12.358	1.00	0.00
ATOM	979	C1'	CYT	87		-21.113	12.414	1.00	0.00
ATOM	980	N1	CYT	87		-20.917	11.097	1.00	0.00
ATOM	981	C6	CYT	87		-21.324	9.941	1.00	0.00
ATOM	982	C5	CYT	87		-21.132	8.729	1.00	0.00
ATOM	983	C4	CYT	87		-20.476	8.707	1.00	0.00
ATOM	984	N4	CYT	87		-20.189	7.556	1.00	0.00
ATOM	985	N3	CYT	87		-20.100	9.839	1.00	0.00
ATOM	986	C2	CYT	87		-20.330	11.053	1.00	0.00
ATOM	987	02	CYT	87		-20.007	12.077	1.00	0.00
ATOM	988	C3'	CYT	87		-22.749	13.707	1.00	0.00
ATOM	989	C2'	CYT	87		-22.585	12.799	1.00	0.00
ATOM	990	03'	CYT	87		-22.871	15.080	1.00	0.00
ATOM	991	P	CYT	88		-24.164	15.700	1.00	0.00
ATOM	992		CYT	88		-25.350	14.897	1.00	0.00
ATOM	993		CYT	88		-24.158	17.163	1.00	0.00
ATOM	994	05'	CYT	88		-23.837	15.462	1.00	0.00
ATOM	995	C5'	CYT	88		-22.866	16.247	1.00	0.00
ATOM	996	C4'	CYT	88		-22.588	15.709	1.00	0.00
ATOM	997	04'	CYT	88		-22.191		1.00	0.00
ATOM	998	C1'	CYT	88		-22.581	13.731	1.00	0.00
ATOM	999	N1	CYT	88		-22.708	12.279	1.00	0.00
ATOM	1000	C6	CYT	88		-23.360	11.838	1.00	0.00
ATOM	1001	C5	CYT	88		-23.504			
ATOM	1002	C4	CYT	88		-22.955	9.612	1.00	0.00
ATOM	1002	N4	CYT	88		-23.054	8.296	1.00	0.00
ATOM	1003	N3	CYT	88		-22.363	10.048	1.00	0.00
ATOM	1005	C2	CYT	88		-22.234	11.378	1.00	0.00
ATOM	1006	02	CYT	88		-21.728	11.749	1.00	0.00
ATOM	1007	C3'	CYT	88		-23.819	15.752	1.00	0.00
ATOM	1008	C2'	CYT	88		-23.968	14.311	1.00	0.00
ATOM	1009	03'	CYT	88		-23.553	16.668	1.00	0.00
ATOM	1010	P	CYT	89		-24.573	16.926	1.00	0.00
ATOM	1011		CYT	89		-25.937	16.560	1.00	0.00
ATOM	1011		CYT	89		-24.310	18.278	1.00	0.00
ATOM	1012	05'		89		-24.094	15.841	1.00	0.00
ATOM	1013	C5'	CYT	89		-22.819	15.919	1.00	0.00
ATOM	1014	C4'	CYT	89		-22.649	14.794	1.00	0.00
ATOM	1016	04'	CYT	89		-22.737	13.536	1.00	0.00
ATOM	1017	C1'	CYT			-23.395	12.602	1.00	0.00
ATOM	1017	N1	CYT			-24.075	11.612	1.00	0.00
MIUM	1010	14.1	UII	υ <del>y</del>	11.563	24.013	11.012	1.00	0.00

743 744 **ATOM** 1019 C6 CYT -10.326 -24.82012.059 1.00 0.00 89 ATOM 1020 C5 CYT 89 -9.400 -25.321 11.217 1.00 0.00 ATOM 1021 C4 CYT 89 -9.582 -25.046 9.820 1.00 0.00 1022 N4 CYT 89 -8.688 -25.470 8.927 1.00 0.00 ATOM ATOM 1023 N3 CYT -10.652 -24.371 9.377 1.00 0.00 89 1024 C2CYT -11.587 -23.886 10.246 1.00 0.00 ATOM 89 ATOM 1025 02 CYT -12.585 -23.315 9.816 1.00 0.00 89 **ATOM** 1026 C3' CYT -13.142 -23.743 14.811 1.00 0.00 89 ATOM 1027 C2' CYT 89 -12.993 -24.420 13.454 1.00 0.00 1028 03' CYT -14.418 -23.153 15.002 ATOM 89 1.00 0.00 ATOM 1029 P THY 90 -15.782 -24.018 15.089 1.00 0.00 OP1 THY -16.719 -23.312 ATOM 1030 90 15.991 1.00 0.00 ATOM 1031 OP2 THY 90 -15.429 -25.431 15.353 1.00 0.00 ATOM 1032 05' THY -16.365 -23.928 13.588 0.00 90 1.00 **ATOM** 1033 C5' THY 90 -16.815 -22.699 13.047 1.00 0.00 ATOM 1034 C4' THY 90 -17.167 -22.869 11.566 1.00 0.00 ATOM 1035 04' THY 90 -16.044 -23.407 10.896 1.00 0.00 THY ATOM 1036 C1' 90 -16.450 -24.403 9.985 1.00 0.00 ATOM 1037 N1 THY 90 -15.318 - 25.3519.815 1.00 0.00 C6 THY ATOM 1038 90 -14.836 - 26.04510.899 1.00 0.00 ATOM 1039 C5THY 90 -13.708 - 26.78810.817 1.00 0.00 ATOM 1040 C7 THY 90 -13.303 - 27.55412.064 1.00 0.00 THY ATOM 1041 C4 90 -12.937 -26.852 9.597 1.00 0.00 04 THY ATOM 1042 90 -11.862 -27.432 9.474 1.00 0.00 ATOM 1043 N3 THY 90 -13.505 -26.168 8.531 1.00 0.00 C2THY ATOM 1044 90 -14.690 - 25.4468.573 1.00 0.00 ATOM 1045 02 THY 90 -15.145 -24.945 7.548 1.00 0.00 C3' THY ATOM 1046 90 -18.341 -23.833 11.318 1.00 0.00 ATOM 1047 C2' THY 90 -17.662 -25.038 10.669 1.00 0.00 03' THY -19.292 -23.202 10.473 1.00 ATOM 1048 90 0.00 ATOM 1049 P ADE -20.717 -23.875 91 10.109 1.00 0.00 **ATOM** 1050 OP1 ADE 91 -21.640 -22.800 9.681 1.00 0.00 OP2 ADE **ATOM** 1051 91 -21.107 -24.783 11.210 1.00 0.00 **ATOM** 1052 05' ADE 91 -20.358 -24.772 8.820 1.00 0.00 ATOM 1053 C5' ADE -20.113 -24.177 91 7.561 1.00 0.00 ATOM 1054 C4' ADE 91 -19.526 -25.199 6.585 1.00 0.00 04' ADE ATOM 1055 91 -18.285 -25.689 7.043 1.00 0.00 C1' ADE ATOM 1056 91 -18.013 -26.855 6.303 1.00 0.00 ATOM 1057 N9 ADE 91 -16.943 -27.629 6.957 1.00 0.00 ATOM 1058 C8 ADE 91 -16.840 -27.9658.281 1.00 0.00 ATOM 1059 N7 ADE 91 -15.725 -28.566 8.594 1.00 0.00 ATOM 1060 C5 ADE 91 -15.054 -28.657 7.377 1.00 0.00 ADE ATOM 1061 60 91 -13.796 -29.171 7.005 1.00 0.00 ATOM 1062 N6 ADE 91 -12.935 -29.687 7.886 1.00 0.00 **ATOM** 1063 NI ADE 91 -13.454 -29.156 5.704 1.00 0.00 ATOM 1064 C2ADE 91 -14.300 -28.639 4.817 1.00 0.00 1065 N3 ADE ATOM 91 -15.483 -28.080 5.043 1.00 0.00 ATOM 1066 C4 ADE 91 -15.807 -28.120 6.364 1.00 0.00 1067 C3' ADE 91 -20.381 - 26.459ATOM 6.373 1.00 0.001068 C2' ADE 91 -19.344 -27.590 ATOM 6.375 1.00 0.00

745 ATOM 1069 03' ADE 91 -21.091 -26.312 1070 P ADE ATOM 92 -21.999 -27.483 4.505 1.00 0.00 ATOM 1071 OP1 ADE 92 -22.962 -26.856 3.572 1.00 0.00 1072 OP2 ADE ATOM 92 -22.489 -28.363 5.590 1.00 0.00 ATOM 1073 05' ADE -20.923 -28.308 92 3.632 1.00 0.00 ATOM 1074 C5' ADE -20.202 -27.687 92 2.582 1.00 0.00 ATOM 1075 C4' ADE -19.130 -28.633 92 2.032 1.00 0.00 ATOM 1076 04' ADE 92 -18.195 -28.963 3.046 1.00 0.00 1077 C1' ADE ATOM 92 -17.827 - 30.3182.908 1.00 0.00 ATOM 1078 N9 ADE 92 -17.261 -30.8274.179 1.00 0.00 1079 68 ADE -17.838 -30.817 ATOM 92 5.425 1.00 0.00 1080 N7 ADE ATOM 92 -17.078 -31.2766.379 1.00 0.00 ATOM 1081 C5 ADE 92 -15.907 -31.622 5.718 1.00 0.00 ATOM 1082 C6 ADE 92 -14.686 -32.164 6.164 1.00 0.00 1083 ATOM N6 ADE 92 -14.460 -32.4287.452 1.00 0.00 1084 N1 ADE ATOM 92 -13.711 -32.393 5.265 1.00 0.00 1085 C2 ADE -13.943 -32.102 ATOM 92 3.987 1.00 0.00 ATOM 1086 N3 ADE 92 -15.044 -31.591 3.440 1.00 0.00 ATOM 1087 C4 ADE -16.006 -31.361 4.374 1.00 92 0.00 C3' ADE ATOM 1088 92 -19.708 -29.9671.532 1.00 0.00 ATOM 1089 C2' ADE 92 -19.178 -30.947 2.580 1.00 0.00 03' ATOM 1090 ADE 92 -19.207 -30.219 0.229 1.00 0.00 ATOM 1091 P CYT 93 -19.705 -31.467 -0.665 1.00 0.001092 OP1 CYT -20.799 -32.165 ATOM 93 0.046 1.00 0.00 OP2 CYT -19.907 -30.998ATOM 1093 93 -2.0541.00 0.00 **ATOM** 1094 05' CYT -18.412 -32.421 -0.63793 1.00 0.00 1095 C5' CYT -17.242 -32.089 -1.3621.00 0.00 ATOM 93 C4' CYT ATOM 1096 93 -16.130 -33.073 -0.9961.00 0.00 1097 04' CYT 93 -15.958 -33.057 0.402 1.00 0.00 ATOM C1' CYT ATOM 1098 93 -15.474 - 34.3090.825 1.00 0.00 ATOM 1099 N1 CYT -15.831 -34.512 2.250 1.00 0.00 93 C6 CYT -17.081 -34.172 ATOM 1100 93 2.705 1.00 0.00 C5 CYT -17.425 -34.314 0.00 ATOM 1101 93 4.005 1.00 ATOM 1102 C4 CYT -16.417 -34.827 4.888 1.00 0.00 93 ATOM 1103 N4 CYT -16.632 -34.904 1.00 93 6.202 0.00 ATOM 1104 N3 CYT -15.211 -35.185 4.430 1.00 93 0.00 **ATOM** 1105 C2 CYT 93 -14.888 -35.052 3.115 1.00 0.00 02 CYT -13.778 -35.399 ATOM 1106 93 2.721 1.00 0.00 ATOM 1107 C3' CYT -16.475 -34.528 0.00 93 -1.3451.00 ATOM 1108 C2' CYT 93 -16.218 -35.309 -0.0581.00 0.00 ATOM 1109 03' CYT 93 -15.648 -35.010 -2.384 1.00 0.00 **END** 

HEADER 000000

REMARK 0.00520 1.66899 0.02539 0.01749 2.60790 1.69038 0.00000 REMARK 2.64204 0.22775 0.56348 1.26581 0.58500 REMARK 0.01047 0.00453 0.00632 0.02002 0.00708

	747				(375)				特開200 748	3-135087
REMARK			126	122	4		0	0	0	
REMARK	0	1	378	305	460	2	273	340		
REMARK		0.03	3463	0.15473	0.03495	0.033	360	0.15473	0.11791	
REMARK		1.58	3204	0.09475						
REMARK			2	2	0		0	0	0	
	0									
ATOM	1	N	GLU	1	9.627 -29		25.81		0.00	
ATOM	2	CA	GLU	1	8.356 -28	8.615	26.18	0 1.00	0.00	
ATOM	3	CB	GLU	1	7.793 -29	9.217	27.47	4 1.00	0.00	
ATOM	4	CG	GLU	1	7.648 -30	0.739	27.37	4 1.00	0.00	
ATOM	5	CD	GLU	1	6.948 -3	1.284	28.61	2 1.00	0.00	
ATOM	6	0E1	GLU	1	7.679 -3	1.715	29.53	0 1.00	0.00	
ATOM	7	0E2	GLU	1	5.700 -3	1.234	28.62	1 1.00	0.00	
ATOM	8	С	GLU	1	8.555 -2	7.103	26.29	9 1.00	0.00	
ATOM	9	0	GLU	1	9.651 -20		26.03		0.00	
ATOM	10	N	LYS	2	7.505 -20		26.69		0.00	
ATOM	11	CA	LYS	2	7.526 -2		26.86		0.00	
ATOM	12	СВ	LYS	2	7.304 -2		25.52		0.00	
ATOM	13	CG	LYS	2	6.014 -2		24.79		0.00	
ATOM	14	CD	LYS	2	5.938 -2		23.37		0.00	
ATOM	15	CE	LYS	2	6.863 -2		22.37		0.00	
ATOM	16	NZ	LYS	2	6.700 -2		21.01		0.00	
ATOM	17	C	LYS	2	6.500 -2		27.94		0.00	
ATOM	18	0	LYS	2	5.333 -2		27.83		0.00	
		N		3						
ATOM	19		HIS		6.944 -23		28.98		0.00	
ATOM	20	CA	HIS	3	6.109 -2		30.11		0.00	
ATOM	21	CB	HIS	3	7.005 -2		31.29		0.00	
ATOM	22		HIS	3	6.227 -2		32.53		0.00	
ATOM	23		HIS	3	5.630 -2		32.70		0.00	
ATOM	24		HIS	3	5.023 -2		33.90		0.00	
ATOM	25		HIS	3	5.169 -2		34.55		0.00	
ATOM	26		HIS	3	5.933 -2		33.68		0.00	
ATOM	27	C	HIS	3	5.114 -2		29.74		0.00	
ATOM	28	0	HIS	3	5.422 -2		29.87		0.00	
ATOM	29	N	ARG	4	3.915 -2		29.30		0.00	
ATOM	30	CA	ARG	4	2.812 -2		28.94		0.00	
ATOM	31	CB	ARG	4	2.147 -2		30.23		0.00	
ATOM	32	CG	ARG	4	0.763 -2		29.97		0.00	
ATOM	33	CD	ARG	. 4	0.190 -2		31.26		0.00	
ATOM	34	NE	ARG	4	0.051 -2		32.34		0.00	
ATOM	35	CZ	ARG	4	-0.937 -2		32.45		0.00	
ATOM	36		ARG	4	-0.952 -2		33.49		0.00	
ATOM	37		ARG	4	-1.903 -2		31.52		0.00	
ATOM	38	С	ARG	4	3.275 -2		28.01		0.00	
ATOM	39	0	ARG	4	3.204 -1		28.36		0.00	
ATOM	40	N	ALA	5	3.756 -2	1.141	26.82	25 1.00	0.00	

	7.40				(3/0)			村用2003
L TOM	749	٥.						750
ATOM	41	CA	ALA	5	4.241 -20.197		1.00	0.00
ATOM	42	CB	ALA	5	5.699 -19.841	26.139	1.00	0.00
ATOM	43	C	ALA	5	4.105 -20.804		1.00	0.00
ATOM	44	0	ALA	5	3.866 -22.003	24.299	1.00	0.00
ATOM	45	N	ARG	6	4.263 -19.967	23.408	1.00	0.00
ATOM	46	CA	ARG	6	4.183 -20.347	22.007	1.00	0.00
ATOM	47	CB	ARG	6	2.736 -20.685	21.601	1.00	0.00
ATOM	48	CG	ARG	6	1.710 -19.648	22.087	1.00	0.00
ATOM	49	CD	ARG	6	0.402 -19.720	21.289	1.00	0.00
ATOM	50	NE	ARG	6	-0.120 -21.092	21.196	1.00	0.00
ATOM	51	CZ	ARG	6	-0.987 -21.515	20.260	1.00	0.00
ATOM	52	NH1	ARG	6	-1.231 -22.820	20.109	1.00	0.00
ATOM	53	NH2	ARG	6	-1.620 -20.659	19.453	1.00	0.00
ATOM	54	C	ARG	6	4.740 -19.211	21.149	1.00	0.00
ATOM	55	0	ARG	6	4.792 -18.065	21.592	1.00	0.00
ATOM	56	N	LYS	7	5.142 -19.545	19.920	1.00	0.00
ATOM	57	CA	LYS	7	5.666 -18.615		1.00	0.00
ATOM	58	CB	LYS	7	7.124 -18.218		1.00	0.00
ATOM	59	CG	LYS	7	7.533 -16.853		1.00	0.00
ATOM	60	CD	LYS	7	6.906 -15.662	19.418	1.00	0.00
ATOM	61	CE	LYS	7	7.212 -14.317	18.731	1.00	0.00
ATOM	62	NZ	LYS	7	6.324 -13.232	19.208	1.00	0.00
ATOM	63	С	LYS	7	5.473 -19.288	17.570	1.00	0.00
ATOM	64	0	LYS	7	5.606 -20.505	17.454	1.00	0.00
ATOM	65	N	ARG	8	5.117 -18.490		1.00	0.00
ATOM	66	CA	ARG	8	4.810 -18.884		1.00	0.00
ATOM	67	CB	ARG	8	4.374 -17.617		1.00	0.00
ATOM	68	CG	ARG	8	3.849 -17.881		1.00	0.00
ATOM	69	CD	ARG	8	2.794 -16.830		1.00	0.00
ATOM	70	NE	ARG	8	1.543 -17.085		1.00	0.00
ATOM	71	CZ	ARG	8	0.297 -17.015		1.00	0.00
ATOM	72		ARG	8	-0.745 -17.357		1.00	0.00
ATOM	73		ARG	8	0.066 -16.615			0.00
ATOM	74	С	ARG	8	5.976 -19.580		1.00	0.00
ATOM	75	0	ARG	8	7.112 -19.112		1.00	0.00
ATOM	76	N	GLN	9	5.678 -20.690		1.00	0.00
ATOM	77	CA	GLN	9	6.631 -21.480		1.00	0.00
ATOM	78	CB	GLN	9	6.396 -22.976	13.328	1.00	0.00
ATOM	79	CG	GLN	9	7.307 -23.923		1.00	0.00
ATOM	80	CD	GLN	9	8.790 -23.602		1.00	0.00
ATOM	81		GLN	9	9.423 -24.044		1.00	0.00
ATOM	82		GLN	9	9.362 -22.844		1.00	
ATOM	83	C	GLN	9	6.479 -21.100		1.00	0.00
ATOM	84	0	GLN	9	5.821 -21.796		1.00	0.00
ATOM	85	N	ALA	10	7.107 -19.983		1.00	0.00
ATOM	86	CA	ALA	10	7.089 -19.499		1.00	0.00
ATOM	87	CB	ALA	10	7.839 -18.169		1.00	
ATOM	88	С	ALA	10	7.718 -20.550		1.00	
ATOM	89	0	ALA	10	8.513 -21.375		1.00	
ATOM	90	N	TRP	11	7.355 -20.526		1.00	
AIUM	30	14	IM	11	1.333 -20.320	1.032	1.00	0.00

751 752 ATOM 6.661 1.00 0.00 91 CA TRP 11 7.870 -21.474 1.00 0.00 ATOM 92 CBTRP 11 6.854 -21.704 5.543 CG TRP 5.588 -22.417 5.915 1.00 0.00 ATOM 93 11 CD1 TRP 4.670 -22.012 6.822 1.00 ATOM 94 11 0.00NE1 TRP 3.637 -22.923 6.896 1.00 ATOM 95 11 0.00 CE2 TRP 3.841 -23.972 6.024 1.00 ATOM 0.00 96 11 CZ2 TRP 3.103 -25.126 5.717 1.00 0.00 ATOM 97 11 CH2 TRP 3.595 -26.017 4.755 1.00 ATOM 98 0.00 11 ATOM 99 CZ3 TRP 11 4.811 -25.752 4.105 1.00 0.00 CE3 TRP 5.539 -24.592 4.417 1.00 ATOM 100 0.0011 ATOM 101 CD2 TRP 5.078 -23.674 5.384 1.00 0.00 11 9.184 -20.976 1.00 ATOM 102 C TRP 11 6.065 0.00 ATOM 103 0 TRP 11 9.324 - 19.7985.740 1.00 0.00 ATOM 104 N LEU 12 10.135 -21.898 5.915 1.00 0.00ATOM 105 CA LEU 12 11.451 -21.677 5.329 1.00 0.00 CBLEU 12.537 -22.355 6.180 1.00 ATOM 106 12 0.00 ATOM 107 CG LEU 12 12.923 -21.583 7.455 1.00 0.00 ATOM 108 CD1 LEU 11.787 -21.488 8.481 1.00 0.00 12 ATOM 109 CD2 LEU 12 14.121 -22.281 8.110 1.00 0.00 ATOM 110 C LEU 12 11.417 -22.284 3.923 1.00 0.00 ATOM 111 0 LEU 12 10.501 -23.047 3.607 1.00 0.00 **ATOM** 112 N TRP 13 12.403 -21.974 3.062 1.00 0.00 ATOM 113 CATRP 13 12.378 -22.553 1.725 1.00 0.00 ATOM CB TRP 13 13.353 -21.951 0.709 1.00 0.00 114 ATOM 115 CG TRP 13 14.815 -22.248 0.848 1.00 0.00 CD1 TRP ATOM 15.697 -21.306 1.206 1.00 0.00 116 13 ATOM 117 NE1 TRP 13 16.974 -21.821 1.261 1.00 0.00 CE2 TRP 16.974 -23.157 0.922 1.00 0.00 ATOM 118 13 CZ2 TRP 17.998 -24.111 **ATOM** 119 13 0.826 1.00 0.00 **ATOM** CH2 TRP 17.683 -25.423 1.00 0.00 120 13 0.442 ATOM CZ3 TRP 16.349 -25.764 1.00 121 13 0.159 0.00 ATOM 122 CE3 TRP 15.331 -24.798 0.259 1.00 0.00 13 ATOM 123 CD2 TRP 15.606 -23.467 0.647 1.00 0.00 13 C TRP 1.749 1.00 ATOM 124 13 12.478 -24.064 0.00 ATOM 0 TRP 12.045 -24.673 0.792 1.00 125 13 0.00 ATOM 126 N GLU 13.013 -24.713 2.785 1.00 0.00 14 CA ATOM 127 GLU 14 13.030 -26.168 2.737 1.00 0.00 GLU ATOM 128 CB 14 13.773 -26.745 3.947 1.00 0.00 CG GLU 13.942 -28.264 ATOM 129 14 3.816 1.00 0.00 ATOM 130 CDGLU 14.761 -28.840 4.967 1.00 0.00 14 OE1 GLU 14.167 -29.593 5.771 1.00 0.00 ATOM 131 14 ATOM 132 OE2 GLU 15.968 -28.518 5.018 1.00 0.00 14 C GLU **ATOM** 133 11.584 -26.658 2.619 1.00 0.00 14 ATOM 134 0 GLU 14 11.259 -27.442 1.730 1.00 0.00 ATOM 135 N GLU 15 10.719 -26.149 3.498 1.00 0.00 ATOM 136 CAGLU 15 9.307 -26.469 3.525 1.00 0.00 **ATOM** GLU 8.682 -25.842 4.776 0.00 137 CB15 1.00 ATOM 138 CG GLU 9.344 -26.269 6.094 1.00 0.00 15 CD GLU 8.996 -25.274 ATOM 139 15 7.191 1.00 0.00 OE1 GLU 9.746 -24.283 ATOM 140 7.309 1.00 0.00 15

特開2003-135087

					(310)				付用るし
	753								754
ATOM	141	0E2	GLU	15	7.970	-25.492	7.870	1.00	0.00
ATOM	142	С	GLU	15	8.609	-25.981	2.245	1.00	0.00
ATOM	143	0	GLU	15	7.973	-26.776	1.560	1.00	0.00
ATOM	144	N	ASP	16	8.706	-24.686	1.916	1.00	0.00
ATOM	145	CA	ASP	16	8.045	-24.110	0.743	1.00	0.00
ATOM	146	CB	ASP	16	8.180	-22.582	0.736	1.00	0.00
ATOM	147	CG	ASP	16	7.375	-21.894	1.831	1.00	0.00
ATOM	148	0D1	ASP	16	6.295	-22.416	2.178	1.00	0.00
ATOM	149	0D2	ASP	16	7.817	-20.811	2.269	1.00	0.00
ATOM	150	C	ASP	16	8.547	-24.669	-0.589	1.00	0.00
ATOM	151	0	ASP	16	7.744	-25.018	-1.453	1.00	0.00
ATOM	152	N	LYS	17	9.869	-24.745	-0.774	1.00	0.00
ATOM	153	CA	LYS	17	10.489	-25.249	-1.992	1.00	0.00
ATOM	154	CB	LYS	17	12.021	-25.040	-1.964	1.00	0.00
ATOM	155	CG	LYS	17	12.657	-25.265	-3.344	1.00	0.00
ATOM	156	CD	LYS	17	14.192	-25.257	-3.278	1.00	0.00
ATOM	157	CE	LYS	17	14.772	-23.861	-3.006	1.00	0.00
ATOM	158	NZ	LYS	17		-23.896	-2.862	1.00	0.00
ATOM	159	С	LYS	17		-26.709	-2.166	1.00	0.00
ATOM	160	0	LYS	17		-27.105	-3.266	1.00	0.00
ATOM	161	N	ASN	18		-27.498	-1.081	1.00	0.00
ATOM	162	CA	ASN	18		-28.886	-1.109	1.00	0.00
ATOM	163	CB	ASN	18		-29.542	0.261	1.00	0.00
ATOM	164	CG	ASN	18		-30.933	0.326	1.00	0.00
ATOM	165	OD1	ASN	18		-31.677	-0.648	1.00	0.00
ATOM	166		ASN	18		-31.283	1.469	1.00	0.00
ATOM	167	С	ASN	18		-28.954	-1.516	1.00	0.00
ATOM	168	0	ASN	18		-29.681	-2.443	1.00	0.00
ATOM	169	N	LEU	19		-28.198	-0.832	1.00	0.00
ATOM	170	CA	LEU	19		-28.152	-1.096	1.00	0.00
ATOM	171	CB	LEU	19		-27.079	-0.213	1.00	0.00
ATOM	172	CG	LEU	19		-27.071	-0.286	1.00	0.00
ATOM	173	CD1	LEU	19	3.108	-28.419	0.166	1.00	0.00
ATOM	174	CD2	LEU	19	3.142	-25.958	0.622	1.00	0.00
ATOM	175	C	LEU	19	5.602	-27.889	-2.578	1.00	0.00
ATOM	176	0	LEU	19	4.894	-28.654	-3.228	1.00	0.00
ATOM	177	N	ARG	20	6.186	-26.808	-3.106	1.00	0.00
ATOM	178	CA	ARG	20	6.065	-26.402	-4.497	1.00	0.00
ATOM	179	CB	ARG	20	6.957	-25.169	-4.718	1.00	0.00
ATOM	180	CG	ARG	20	6.771	-24.558	-6.109	1.00	0.00
ATOM	181	CD	ARG	20	7.841	-23.495	-6.390	1.00	0.00
ATOM	182	NE	ARG	20	7.788	-23.054	-7.791	1.00	0.00
ATOM	183	CZ	ARG	20	6.850	-22.247	-8.313	1.00	0.00
ATOM	184	NH1	ARG	20	6.771	-22.080	-9.637	1.00	0.00
ATOM	185	NH2	ARG	20	5.973	-21.619	-7.522	1.00	0.00
ATOM	186	C	ARG	20	6.449	-27.572	-5.413	1.00	0.00
ATOM	187	0	ARG	20		-27.924	-6.335	1.00	0.00
ATOM	188	N	SER	21	7.610	-28.187	-5.160	1.00	0.00
ATOM	189	CA	SER	21	8.088	-29.327	-5.932	1.00	0.00
ATOM	190	CB	SER	21	9.485	-29.735	-5.458	1.00	0.00

					(379)				特開2(
	755								756
ATOM	191	0G	SER	21		-28.620	-5.555	1.00	0.00
ATOM	192	C	SER	21		-30.482	-5.859	1.00	0.00
ATOM	193	0	SER	21		-31.142	-6.864	1.00	0.00
ATOM	194	N	GLY	22	6.502	-30.706	-4.679	1.00	0.00
ATOM	195	CA	GLY	22	5.505	-31.734	-4.445	-1.00	0.00
ATOM	196	C	GLY	22	4.280	-31.493	-5.318	1.00	0.00
ATOM	197	0	GLY	22	3.784	-32.429	-5.939	1.00	0.00
ATOM	198	N	VAL	23	3.806	-30.242	-5.384	1.00	0.00
ATOM	199	CA	VAL	23	2.661	-29.889	-6.211	1.00	0.00
ATOM	200	CB	VAL	23	2.240	-28.423	-6.006	1.00	0.00
ATOM	201	CG1	VAL	23	1.130	-28.038	-6.994	1.00	0.00
ATOM	202	CG2	VAL	23	1.700	-28.225	-4.584	1.00	0.00
ATOM	203	C	VAL	23	2.961	-30.232	-7.671	1.00	0.00
ATOM	204	0	VAL	23	2.112	-30.813	-8.340	1.00	0.00
ATOM	205	N	ARG	24	4.154	-29.907	-8.186	1.00	0.00
ATOM	206	CA	ARG	24	4.464	-30.270	-9.569	1.00	0.00
ATOM	207	CB	ARG	24	5.775	-29.638	-10.062	1.00	0.00
ATOM	208	CG	ARG	24	5.608	-28.233	-10.661	1.00	0.00
ATOM	209	CD	ARG	24	5.539	-27.123	-9.608	1.00	0.00
ATOM	210	NE	ARG	24	6.747	-27.100	-8.775	1.00	0.00
ATOM	211	CZ	ARG	24	7.951	-26.621	-9.135	1.00	0.00
ATOM	212	NH1	ARG	24	8.128	-26.064	-10.341	1.00	0.00
ATOM	213	NH2	ARG	24	8.983	-26.697	-8.281	1.00	0.00
ATOM	214	C	ARG	24	4.547	-31.795	-9.734	1.00	0.00
ATOM	215	0	ARG	24	4.048	-32.337	-10.717	1.00	0.00
ATOM	216	N	LYS	25	5.201	-32.482	-8.793	1.00	0.00
ATOM	217	CA	LYS	25	5.422	-33.921	-8.839	1.00	0.00
ATOM	218	CB	LYS	25	6.435	-34.316	-7.754	1.00	0.00
ATOM	219	CG	LYS	25	6.922	-35.771	-7.872	1.00	0.00
ATOM	220	CD	LYS	25	7.632	-36.134	-9.185	1.00	0.00
ATOM	221	CE	LYS	25	8.839	-35.232	-9.473	1.00	0.00
ATOM	222	NZ	LYS	25	9.589	-35.694	-10.656	1.00	0.00
ATOM	223	C	LYS	25	4.151	-34.775	-8.766	1.00	0.00
ATOM	224	0	LYS	25	4.062	-35.765	-9.491	1.00	0.00
ATOM	225	N	TYR	26	3.199	-34.435	-7.888	1.00	0.00
ATOM	226	CA	TYR	26	1.981	-35.219	-7.679	1.00	0.00
ATOM	227	CB	TYR	26	2.058	-35.853	-6.283	1.00	0.00
ATOM	228	CG	TYR	26	3.344	-36.614	-6.025	1.00	0.00
ATOM	229	CD1	TYR	26	3.527	-37.895	-6.578	1.00	0.00
ATOM	230	CE1	TYR	26	4.721	-38.599	-6.349	.1.00	0.00
ATOM	231	CZ	TYR	26	5.737	-38.023	-5.567	1.00	0.00
ATOM	232	OH	TYR	26	6.900	-38.698	-5.343	1.00	0.00
ATOM	233	CE2	TYR	26	5.557	-36.743	-5.018	1.00	0.00
ATOM	234	CD2	TYR	26	4.363	-36.039	-5.244	1.00	0.00
ATOM	235	C	TYR	26	0.684	-34.421	-7.832	1.00	0.00
ATOM	236	0	TYR	26	-0.379	-34.927	-7.479	1.00	0.00
ATOM	237	N	GLY	27	0.739	-33.190	-8.347	1.00	0.00
ATOM	238	CA	GLY	27		-32.355		1.00	0.00
ATOM	239	C	GLY	27	-0.862	-31.766	-7.157	1.00	0.00
ATOM	240	0	GLY	27	-0.218	-32.013	-6.139	1.00	0.00

					(380)			特開 2 0
	757							758
ATOM	241	N	GLU	28	-1.950 -30.991	-7.149	1.00	0.00
ATOM	242	CA	GLU	28	-2.495 -30.368	-5.948	1.00	0.00
ATOM	243	CB	GLU	28	-3.078 -28.996	-6.336	1.00	0.00
MOTA	244	CG	GLU	28	-3.329 -28.087	-5.125	1.00	0.00
ATOM	245	CD	GLU	28	-3.729 -26.664	-5.502	1.00	0.00
ATOM	246	0E1	GLU	28	-3.180 -26.121	-6.489	1.00	0.00
ATOM	247	0E2	GLU	28	-4.541 -26.079	-4.753	1.00	0.00
ATOM	248	С	GLU	28	-3.535 -31.308	-5.314	1.00	0.00
ATOM	249	0	GLU	28	-3.979 -32.266	-5.947	1.00	0.00
ATOM	250	N	GLY	29	-3.927 -31.037	-4.065	1.00	0.00
ATOM	251	CA	GLY	29	-4.933 -31.803	-3.341	1.00	0.00
ATOM	252	С	GLY	29	-4.565 -33.264	-3.097	1.00	0.00
ATOM	253	0	GLY	29	-5.320 -34.167	-3.451	1.00	0.00
ATOM	254	N	ASN	30	-3.409 -33.494	-2.470	1.00	0.00
ATOM	255	CA	ASN	30	-2.908 -34.819	-2.112	1.00	0.00
ATOM	256	СВ	ASN	30	-2.549 -35.660	-3.347	1.00	0.00
ATOM	257	CG	ASN	30	-1.451 -35.045	-4.207	1.00	0.00
ATOM	258		ASN	30	-0.304 -35.481	-4.161	1.00	0.00
ATOM	259		ASN	30	-1.800 -34.054	-5.021	1.00	0.00
ATOM	260	C	ASN	30	-1.739 -34.642	-1.144	1.00	0.00
ATOM	261	0	ASN	30	-0.659 -35.210	-1.312	1.00	0.00
ATOM	262	N	TRP	31	-1.974 -33.829	-0.113	1.00	0.00
ATOM	263	CA	TRP	31	-0.982 -33.513	0.901	1.00	0.00
	264	CB	TRP	31	-1.438 -32.326			0.00
ATOM		CG		31		1.757	1.00	
MOTA	265		TRP		-2.139 -31.291	0.934	1.00	0.00
ATOM	266	CD1		31	-3.470 -31.057	0.905	1.00	0.00
MOTA	267	NE1		31	-3.745 -30.051	0.001	1.00	0.00
ATOM	268		TRP	31	-2.592 -29.585	-0.595	1.00	0.00
ATOM	269		TRP	31	-2.341 -28.598	-1.559	1.00	0.00
ATOM	270		TRP	31	-1.018 -28.368	-1.967	1.00	0.00
ATOM	271		TRP	31	0.031 -29.119	-1.416	1.00	0.00
ATOM	272		TRP	31	-0.231 -30.106	-0.452	1.00	0.00
ATOM	273		TRP	31	-1.548 -30.363	-0.016		
ATOM	274	C	TRP	31	-0.551 -34.764	1.660	1.00	
ATOM	275	0	TRP	31	0.584 -34.814	2.124	1.00	
ATOM	276	N	SER	32	-1.413 -35.789	1.749	1.00	0.00
ATOM	277	CA	SER	32	-1.047 -37.051	2.383	1.00	
ATOM	278	CB	SER	32	-2.203 -38.058	2.327	1.00	
ATOM	279	0G	SER	32	-3.400 -37.505	2.811	1.00	
ATOM	280	C	SER	32	0.148 -37.652	1.638	1.00	
ATOM	281	0	SER	32	1.142 -38.044	2.248	1.00	
ATOM	282	N	LYS	33	0.033 -37.721	0.306	1.00	
ATOM	283	CA	LYS	33	1.060 -38.269	-0.562	1.00	
ATOM	284	CB	LYS	33	0.581 -38.330	-2.020	1.00	
ATOM	285	CG	LYS	33	-0.704 -39.147	-2.190	1.00	
ATOM	286	CD	LYS	33	-1.015 -39.310	-3.685	1.00	
ATOM	287	CE	LYS	33	-2.356 -40.015	-3.932	1.00	
ATOM	288	NZ	LYS	33	-3.511 -39.190	-3.526	1.00	
ATOM	289	C	LYS	33	2.327 -37.431	-0.444	1.00	
ATOM	290	0	LYS	33	3.386 -37.968	-0.135	1.00	0.00

					(301)				が用るし
	759								760
ATOM	291	N	ILE	34	2.221	-36.119	-0.687	1.00	0.00
ATOM	292	CA	ILE	34	3.351	-35.198	-0.617	1.00	0.00
ATOM	293	CB	ILE	34	2.859	-33.761	-0.889	1.00	0.00
ATOM	294	CG2	ILE	34	3.963	-32.721	-0.645	1.00	0.00
ATOM	295	CG1	ILE	34	2.364	-33.655	-2.347	1.00	0.00
ATOM	296	CD1	ILE	34	1.544	-32.392	-2.627	1.00	0.00
ATOM	297	C	ILE	34	4.094	-35.368	0.718	1.00	0.00
ATOM	298	0	ILE	34	5.314	-35.531	0.734	1.00	0.00
ATOM	299	N	LEU	35	3.363	-35.354	1.837	1.00	0.00
ATOM	300	CA	LEU	35	3.924	-35.525	3.172	1.00	0.00
ATOM	301	CB	LEU	35	2.829	-35.299	4.227	1.00	0.00
ATOM	302	CG	LEU	35	3.341	-35.406	5.676	1.00	0.00
ATOM	303	CD1	LEU	35	2.623	-34.384	6.566	1.00	0.00
ATOM	304	CD2	LEU	35	3.102	-36.807	6.260	1.00	0.00
ATOM	305	С	LEU	35	4.608	-36.886	3.316	1.00	0.00
ATOM	306	0	LEU	35	5.665	-36.965	3.933	1.00	0.00
ATOM	307	N	LEU	36	4.021	-37.952	2.758	1.00	0.00
ATOM	308	CA	LEU	36	4.588	-39.294	2.831	1.00	0.00
ATOM	309	CB	LEU	36	3.551	-40.303	2.304	1.00	0.00
ATOM	310	CG	LEU	36	3.927	-41.797	2.343	1.00	0.00
ATOM	311	CD1	LEU	36	4.859	-42.225	1.202	1.00	0.00
ATOM	312	CD2	LEU	36	4.491	-42.229	3.700	1.00	0.00
ATOM	313	C	LEU	36	5.917	-39.343	2.074	1.00	0.00
ATOM	314	0	LEU	36	6.914	-39.834	2.599	1.00	0.00
ATOM	315	N	HIS	37	5.929	-38.839	0.836	1.00	0.00
ATOM	316	CA	HIS	37	7.104	-38.818	-0.023	1.00	0.00
ATOM	317	CB	HIS	37	6.722	-38.273	-1.406	1.00	0.00
ATOM	318	CG	HIS	37	5.704	-39.112	-2.135	1.00	0.00
ATOM	319	ND1	HIS	37	5.886	-40.467	-2.371	1.00	0.00
ATOM	320	CE1	HIS	37	4.803	-40.905	-3.036	1.00	0.00
ATOM	321	NE2	HIS	37	3.908	-39.941	-3.262	1.00	0.00
ATOM	322	CD2	HIS	37	4.485	-38.811	-2.690	1.00	0.00
ATOM	323	С	HIS	37	8.240	-37.988	0.576	1.00	0.00
ATOM	324	0	HIS	37		-38.417	0.539	1.00	0.00
ATOM	325	N	TYR	38	7.920	-36.802	1.103	1.00	0.00
ATOM	326	CA	TYR	38		-35.878	1.676	1.00	0.00
ATOM	327	CB	TYR	38		-34.533	0.957	1.00	0.00
ATOM	328	CG	TYR	38		-34.627	-0.557	1.00	0.00
ATOM	329		TYR	38		-34.321	-1.270	1.00	0.00
ATOM	330		TYR	38		-34.403	-2.670	1.00	0.00
ATOM	331	CZ	TYR	38		-34.789	-3.366	1.00	0.00
ATOM	332	OH	TYR	38		-34.864	-4.729	1.00	0.00
ATOM	333		TYR	38		-35.096	-2.658	1.00	0.00
ATOM	334		TYR	38		-35.015	-1.253	1.00	0.00
ATOM	335	C	TYR	38		-35.781	3.195	1.00	0.00
ATOM	336	0	TYR	38		-36.794	3.862	1.00	0.00
ATOM	337	N	LYS	39		-34.564	3.739	1.00	0.00
ATOM	338	CA	LYS	39 20		-34.255 -24.800	5.154	1.00	0.00
ATOM	339	CB	LYS	39 20		-34.809	5.942	1.00	0.00
ATOM	340	CG	LYS	39	11.24/	-34.304	5.401	1.00	0.00

	504				(302)				付用 2(
. =	761								762
ATOM	341	CD	LYS	39		-34.687	6.314	1.00	0.00
ATOM	342	CE	LYS	39		-36.206	6.422	1.00	0.00
ATOM	343		LYS	39	13.823	-36.551	7.180	1.00	0.00
ATOM	344	C	LYS	39	8.576	-32.740	5.322	1.00	0.00
ATOM	345	0	LYS	39	8.875	-31.988	4.394	1.00	0.00
ATOM	346	N	PHE	40	8.142	-32.306	6.510	1.00	0.00
ATOM	347	CA	PHE	40	7.965	-30.909	6.884	1.00	0.00
ATOM	348	CB	PHE	40	6.542	-30.445	6.539	1.00	0.00
ATOM	349	CG	PHE	40	6.211	-30.513	5.060	1.00	0.00
ATOM	350	CD1	PHE	40	5.544	-31.633	4.523	1.00	0.00
ATOM	351	CE1	PHE	40	5.252	-31.685	3.149	1.00	0.00
ATOM	352	CZ	PHE	40	5.622	-30.621	2.309	1.00	0.00
ATOM	353	CE2	PHE	40	6.286	-29.507	2.845	1.00	0.00
ATOM	354	CD2	PHE	40	6.581	-29.450	4.216	1.00	0.00
ATOM	355	C	PHE	40	8.242	-30.778	8.384	1.00	0.00
ATOM	356	0	PHE	40	8.367	-31.789	9.072	1.00	0.00
ATOM	357	N	ASN	41		-29.537	8.882	1.00	0.00
ATOM	358	CA	ASN	41		-29.225	10.284	1.00	0.00
ATOM	359	СВ	ASN	41		-27.700	10.465	1.00	0.00
ATOM	360	CG	ASN	41		-27.259	11.902	1.00	0.00
ATOM	361		ASN	41		-27.437	12.777	1.00	0.00
ATOM	362		ASN	41		-26.651	12.149	1.00	0.00
ATOM	363	С	ASN	41		-29.970	11.213	1.00	0.00
ATOM	364	0	ASN	41		-30.883	11.929	1.00	0.00
ATOM	365	N	ASN	42		-29.578	11.187	1.00	0.00
ATOM	366	CA	ASN	42		-30.154	11.969	1.00	0.00
ATOM	367	СВ	ASN	42		-29.802	13.460	1.00	0.00
ATOM	368	CG	ASN	42		-30.600	14.355	1.00	0.00
ATOM	369		ASN	42		-31.523	15.044	1.00	0.00
ATOM	370		ASN	42		-30.248	14.365	1.00	0.00
ATOM	371	C	ASN	42		-29.600	11.361	1.00	0.00
ATOM	372	0	ASN	42		-28.829	11.992	1.00	0.00
ATOM	373	N	ARG	43		-29.963	10.100		
ATOM	374	CA	ARG	43	•	-29.489			0.00
ATOM	375	СВ	ARG			-29.047		1.00	0.00
ATOM	376	CG	ARG	43		-27.638	7.890	1.00	0.00
ATOM	377	CD	ARG	43		-27.407	8.884	1.00	0.00
ATOM	378	NE	ARG	43		-26.134	8.646	1.00	0.00
ATOM	379	CZ	ARG	43		-24.938	9.148	1.00	0.00
ATOM	380		ARG	43		-24.772	9.763	1.00	0.00
ATOM	381		ARG	43		-23.929	9.031	1.00	0.00
ATOM	382	C	ARG	43		-30.569	9.166	1.00	0.00
ATOM	383	0	ARG	43		-31.759	9.130	1.00	0.00
ATOM	384	N	THR	44		-30.112	9.050	1.00	0.00
ATOM	385	CA	THR	44		-30.112	8.854	1.00	0.00
ATOM	386	CB	THR	44		-30.450	9.871	1.00	0.00
ATOM	387		THR	44		-30.577	11.313	1.00	0.00
ATOM	388		THR	44		-29.102	9.604	1.00	0.00
ATOM	389	C C	THR	44		-30.648	7.443	1.00	0.00
ATOM	390		THR						
AIUM	390	0	ınk	44	-0.901	-29.772	6.738	1.00	0.00

	763			•					764
ATOM	391	N	SER	45	-2.508	-31.381	7.042	1.00	0.00
ATOM	392	CA	SER	45		-31.194	5.752	1.00	0.00
ATOM	393	СВ	SER	45		-32.185	5.635	1.00	0.00
ATOM	394	0G	SER	45		-31.969	4.435	1.00	0.00
ATOM	395	C	SER	45		-29.744	5.641	1.00	0.00
ATOM	396	0	SER	45		-29.105	4.603	1.00	0.00
ATOM	397	N	VAL	46		-29.224	6.731	1.00	0.00
ATOM	398	CA	VAL	46		-27.857	6.818	1.00	0.00
ATOM	399	CB	VAL	46		-27.585	8.211	1.00	0.00
ATOM	400		VAL	46		-26.134	8.331	1.00	0.00
ATOM	401		VAL	46		-28.512	8.513	1.00	0.00
ATOM	402	C	VAL	46		-26.888	6.521	1.00	0.00
ATOM	403	0	VAL	46		-26.024	5.656	1.00	0.00
ATOM	404	N	MET	47		-27.031	7.241	1.00	0.00
ATOM	405	CA	MET	47		-26.168	7.055	1.00	0.00
ATOM	406	СВ	MET	47		-26.590	7.997	1.00	0.00
ATOM	407	CG	MET	47		-26.351	9.475	1.00	0.00
ATOM	408	SD	MET	47	-0.371	-24.622	9.989	1.00	0.00
ATOM	409	CE	MET	47	-0.555	-24.864	11.770	1.00	0.00
ATOM	410	C	MET	47	-0.809	-26.214	5.608	1.00	0.00
ATOM	411	0	MET	47	-0.629	-25.171	4.987	1.00	0.00
ATOM	412	N	LEU	48	-0.582	-27.419	5.078	1.00	0.00
ATOM	413	CA	LEU	48	-0.088	-27.639	3.725	1.00	0.00
ATOM	414	CB	LEU	48	0.063	-29.148	3.468	1.00	0.00
ATOM	415	CG	LEU	48	1.258	-29.707	4.259	1.00	0.00
ATOM	416	CD1	LEU	48	1.106	-31.195	4.585	1.00	0.00
ATOM	417	CD2	LEU	48	2.561	-29.522	3.480	1.00	0.00
ATOM	418	C	LEU	48		-26.969	2.677	1.00	0.00
ATOM	419	0	LEU	48	-0.486	-26.159	1.886	1.00	0.00
ATOM	420	N	LYS	49	-2.269	-27.302	2.666	1.00	0.00
ATOM	421	CA	LYS	49	-3.189	-26.733	1.695	1.00	0.00
ATOM	422	CB	LYS	49		-27.438	1.738	1.00	0.00
ATOM	423	CG	LYS	49		-26.899	2.741	1.00	0.00
ATOM	424	CD	LYS	49		-25.693	2.197	1.00	0.00
ATOM	425	CE	LYS	49		-25.125	3.273	1.00	0.00
ATOM	426	NZ	LYS	49		-23.876	2.831	1.00	0.00
ATOM	427	C	LYS	49		-25.214	1.826	1.00	0.00
ATOM	428	0	LYS	49		-24.515	0.816	1.00	0.00
ATOM	429	N	ASP	50 50		-24.692	3.054	1.00	0.00
ATOM	430	CA	ASP	50 50		-23.260	3.261	1.00	0.00
ATOM	431	CB	ASP	50 50		-22.943	4.698	1.00	0.00
ATOM	432	CG	ASP	50 50		-21.459	4.818 5.572	1.00	0.00
ATOM ATOM	433 434		ASP ASP	50 50		-20.780 -21.025	4.148	1.00	0.00
ATOM	434	C	ASP	50 50		21.025	2.850	1.00	0.00
ATOM	435	0	ASP	50		-22.493	2.236	1.00	0.00
ATOM	430	N	ARG	50 ·		-23.027	3.166	1.00	0.00
ATOM	438	CA	ARG	51		-22.377	2.780	1.00	0.00
ATOM	439	CB	ARG	51		-23.108	3.354	1.00	0.00
ATOM	440	CG	ARG	51		-22.234	3.477	1.00	0.00

					(384)				特開2(
	765								766
ATOM	441	CD	ARG	51	2.891	-21.269	2.324	1.00	0.00
ATOM	442	NE	ARG	51	4.219	-20.649	2.457	1.00	0.00
ATOM	443	CZ	ARG	51	4.513	-19.340	2.352	1.00	0.00
ATOM	444	NH1	ARG	51	3.547	-18.413	2.332	1.00	0.00
ATOM	445	NH2	ARG	51	5.791	-18.955	2.267	1.00	0.00
ATOM	446	С	ARG	51	0.174	-22.332	1.253	1.00	0.00
ATOM	447	0	ARG	51	0.381	-21.265	0.681	1.00	0.00
ATOM	448	N	TRP	52	-0.041	-23.469	0.576	1.00	0.00
ATOM	449	CA	TRP	52		-23.462	-0.877	1.00	0.00
ATOM	450	СВ	TRP	52		-24.860	-1.457	1.00	0.00
ATOM	451	CG	TRP	52		-24.875	-2.956	1.00	0.00
ATOM	452	CD1		52		-25.301	-3.715	1.00	0.00
ATOM	453	NE1		52		-25.170	-5.052	1.00	0.00
ATOM	454		TRP	52		-24.637	-5.225	1.00	0.00
ATOM	455		TRP	52		-24.309	-6.360	1.00	0.00
ATOM	456		TRP	52		-23.773	-6.189	1.00	0.00
ATOM	457		TRP	52		-23.564	-4.900	1.00	0.00
ATOM	458		TRP	52		-23.894	-3.768	1.00	0.00
ATOM	459		TRP	52		-24.440	-3.898	1.00	0.00
ATOM	460	C	TRP	52		-22.485	-1.415	1.00	0.00
ATOM	461	0		- 52		-21.793	-2.390	1.00	0.00
ATOM	462	N	ARG	53		-22.413	-0.788	1.00	0.00
ATOM	463	CA	ARG	53		-21.510	-1.204	1.00	0.00
ATOM	464	CB	ARG	53		-21.734	-0.333	1.00	0.00
ATOM	465	CG	ARG	53		-20.846	-0.757	1.00	0.00
ATOM	466	CD	ARG	53		-21.213	0.035	1.00	0.00
ATOM	467	NE	ARG	53		-20.865	1.461	1.00	0.00
ATOM	468	CZ	ARG	53		-20.778	2.302	1.00	0.00
ATOM	469		ARG	53		-20.342	3.551	1.00	0.00
ATOM	470		ARG	53		-21.179	1.920	1.00	0.00
ATOM	471	С	ARG	53		-20.056	-1.158	1.00	0.00
ATOM	472	0	ARG	53		-19.364	-2.171	1.00	0.00
ATOM	473		THR	54		-19.583			
ATOM	474	CA	THR	54		-18.205	0.157	1.00	0.00
ATOM		. CB	THR	54		-17.869	1.648	1.00	0.00
ATOM	476		THR	54		-18.247	2.212	1.00	0.00
ATOM	477		THR	54		-16.487	1.850	1.00	0.00
ATOM	478	С	THR	54		-17.901	-0.753	1.00	0.00
ATOM	479	0	THR	54		-16.890	-1.453	1.00	0.00
ATOM	480	N	MET	55		-18.787	-0.750	1.00	0.00
ATOM	481	CA	MET	55		-18.655	-1.535	1.00	0.00
ATOM	482	СВ	MET	55		-19.798	-1.149	1.00	0.00
ATOM	483	CG	MET	55		-19.626	-1.759	1.00	
ATOM	484	SD	MET	55		-20.594	-1.002	1.00	
ATOM	485	CE	MET	55		-22.251	-1.524	1.00	
ATOM	486	C	MET	55		-18.590	-3.037	1.00	
ATOM	487	0	MET	55		-17.677	-3.720	1.00	0.00
ATOM	488	N.	LYS	56		-19.543	-3.558	1.00	
ATOM	489	CA	LYS	56		-19.584	-4.969	1.00	
ATOM	490	CB	LYS	56		-20.922	-5.350	1.00	
		25	2.0		0.00L	20.000	3.000	1.00	0.00

```
767
                                                                   768
ATOM
        491
             CG LYS
                         56
                                 -2.130 -20.974 -5.204 1.00 0.00
             CD
                 LYS
ATOM
        492
                         56
                                 -2.638 -22.393 -5.477
                                                          1.00
                                                                0.00
             CE
                 LYS
                                                 -5.791
ATOM
        493
                         56
                                 -4.138 -22.408
                                                          1.00
                                                                0.00
                                                                0.00
             NZ
                                 -4.630 -23.775
                                                 -6.050
ATOM
        494
                 LYS
                         56
                                                         1.00
ATOM
             C
                 LYS
                                 -0.768 -18.356
                                                 -5.354
                                                         1.00
                                                                0.00
        495
                         56
                                                                0.00
ATOM
             0
                 LYS
                                 -0.542 - 17.773
                                                 -6.413
                                                         1.00
        496
                         56
ATOM
        497
             N
                 LYS
                         57
                                 -1.708 -17.946
                                                 -4.491
                                                         1.00
                                                                0.00
             CA
                 LYS
                                 -2.525 -16.767
                                                 -4.739
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        498
                         57
ATOM
        499
             CB
                 LYS
                         57
                                 -3.622 -16.626
                                                 -3.674
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             CG
                 LYS
                                 -4.819 -17.563
                                                 -3.902
        500
                         57
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        501
             CD
                 LYS
                         57 ·
                                 -5.622 -17.300
                                                 -5.188
                                                         1.00
                                                                0.00
        502
             CE
                 LYS
                                 -6.034 -15.830
                                                 -5.349
                                                                0.00
ATOM
                         57
                                                          1.00
ATOM
        503
             NZ
                 LYS
                         57
                                 -6.934 -15.637
                                                 -6.501
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        504
             C
                  LYS
                         57
                                 -1.666 -15.503
                                                 -4.803
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        505
             0
                  LYS
                         57
                                 -2.086 -14.537
                                                 -5.438
                                                          1.00
                                                                0.00
        506
             N
                  LEU
                         58
                                 -0.484 -15.500
                                                 -4.168
ATOM
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        507
             CA
                  LEU
                         58
                                  0.410 -14.354
                                                  -4.184
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        508
             CB
                  LEU
                         58
                                  1.353 -14.387
                                                  -2.964
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        509
             CG
                 LEU
                         58
                                  2.058 -13.063 -2.605
                                                          1.00
                                                                0.00
             CD1 LEU
ATOM
        510
                         58
                                  3.062 -12.583 - -3.658
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        511
             CD2 LEU
                         58
                                  1.064 -11.939
                                                  -2.287
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        512
             C
                  LEU
                         58
                                   1.079 - 14.254
                                                  -5.552
                                                          1.00
                                                                0.00
             0
                  LEU
ATOM
        513
                         58
                                  0.549 - 13.607
                                                  -6.453
                                                          1.00
                                                                0.00
             N
                  LYS
ATOM
        514
                         59
                                  2.236 -14.893
                                                 -5.717
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        515
             CA LYS
                         59
                                  2.988 -14.905
                                                  -6.962
                                                          1.00
                                                                0.00
                 LYS
ATOM
        516
             CB
                         59
                                  3.597 -13.515
                                                 -7.227
                                                                0.00
                                                          1.00
             CG
                LYS
                                   4.079 -13.328
ATOM
        517
                         59
                                                 -8.672
                                                          1.00
                                                                0.00
             CD LYS
ATOM
        518
                         59
                                   2.922 -13.396
                                                 -9.684
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        519
             CE LYS
                                   2.998 -14.623 -10.603
                         59
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        520
             NZ LYS
                                   4.231 -14.622 -11.411
                         59
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        521
             С
                  LYS
                                   4.040 -16.001
                                                  -6.838
                         59
                                                          1.00
                                                                 0.00
             0
ATOM
        522
                  LYS
                         59
                                   5.206 -15.809
                                                 -7.178
                                                                 0.00
                                                          1.00
ATOM
        523
             N
                  LEU
                         60
                                   3.613 -17.154
                                                  -6.315
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             CA LEU
        524
                         60
                                   4.483 -18.302
                                                  -6.104
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        525
              CB
                  LEU
                                   5.051 -18.304
                                                 -4.675
                         60
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        526
              CG LEU
                         60
                                   6.147 -17.256
                                                  -4.408
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CD1 LEU
ATOM
        527
                         60
                                   5.575 -16.004
                                                  -3.727
                                                          1.00
                                                                0.00
              CD2 LEU
ATOM
        528
                         60
                                   7.224 - 17.849
                                                  -3.492
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        529
              C
                  LEU
                                   3.644 -19.536
                                                  -6.404
                         60
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        530
              0
                  LEU
                         60
                                   3.438 -20.392
                                                 -5.545
                                                          1.00
                                                                 0.00
        531
              N
                  ILE
                         61
                                   3.154 -19.601
                                                  -7.643
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
        532
              CA ILE
                         61
                                   2.308 -20.667
                                                  -8.146
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              CB ILE
        533
                         61
                                   1.033 - 20.048
                                                  -8.744
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        534
              CG2 ILE
                         61
                                   1.309 -19.093 -9.912
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CG1 ILE
ATOM
        535
                         61
                                   0.035 -21.136 -9.137
                                                          1.00
                                                                0.00
              CD1 ILE
ATOM
        536
                         61
                                  -1.408 - 20.634
                                                  -9.155
                                                          1.00
                                                                0.00
              С
                  ILE
ATOM
         537
                         61
                                   3.106 -21.555
                                                  -9.100
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         538
              0
                  ILE
                         61
                                   4.194 -21.172
                                                  -9.526
                                                          1.00
                                                                 0.00
         539
              N
                  SER
                         62
                                   2.581 -22.751
                                                  -9.404
ATOM
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         540
              CA SER
                         62
                                   3.188 -23.769 -10.256 1.00 0.00
```

					(380)	付用とし
	769					770
ATOM	541	CB	SER	62	2.120 -24.766 -10.722 1.00	0.00
ATOM	542	0G	SER	62	1.067 -24.108 -11.395 1.00	0.00
ATOM	543	С	SER	62	3.967 -23.178 -11.432 1.00	0.00
ATOM	544	0	SER	62	5.096 -23.597 -11.687 1.00	0.00
ATOM	545	N	SER	63	3.364 -22.202 -12.119 1.00	0.00
ATOM	546	CA	SER	63	3.945 -21.505 -13.250 1.00	0.00
ATOM	547	СВ	SER	63	3.028 -20.350 -13.662 1.00	0.00
ATOM	548	OG	SER	63	1.706 -20.782 -13.891 1.00	0.00
ATOM	549	С	SER	63	5.343 -20.958 -12.953 1.00	0.00
ATOM	550	0	SER	63	6.311 -21.413 -13.561 1.00	0.00
ATOM	551	N	ASP	64	5.455 -19.969 -12.052 1.00	0.00
ATOM	552	CA	ASP	64	6.720 -19.310 -11.735 1.00	0.00
ATOM	553	CB	ASP	64	6.683 -18.654 -10.339 1.00	0.00
ATOM	554	CG	ASP	64	5.502 -17.715 -10.104 1.00	0.00
ATOM	555	0D1		64	4.415 -18.249 -9.792 1.00	0.00
ATOM	556	OD2		64	5.701 -16.486 -10.208 1.00	0.00
ATOM	557	C	ASP	64	7.050 -18.326 -12.868 1.00	0.00
ATOM	558	0	ASP	64	7.086 -17.112 -12.680 1.00	0.00
ATOM	559	N	SER	65	7.292 -18.871 -14.066 1.00	0.00
ATOM	560	CA	SER	65	7.625 -18.141 -15.279 1.00	0.00
ATOM	561	CB	SER	65	8.274 -19.109 -16.276 1.00	0.00
ATOM	562	OG	SER	65	9.385 -19.751 -15.681 1.00	0.00
ATOM	563	C	SER	65	6.394 -17.464 -15.890 1.00	0.00
ATOM	564	0	SER		. 5.999 -17.784 -17.010 1.00	0.00
ATOM	565	N	GLU	66	5.803 -16.515 -15.160 1.00	0.00
ATOM	566	CA	GLU	66	4.656 -15.722 -15.582 1.00	0.00
ATOM	567	CB	GLU	66	3.331 -16.473 -15.351 1.00	0.00
ATOM	568	CG	GLU	66	2.923 -16.572 -13.875 1.00	0.00
ATOM	569	CD	GLU	66	1.643 -17.373 -13.648 1.00	0.00
ATOM	570		GLU	66	1.077 -17.216 -12.546 1.00	0.00
ATOM	571		GLU	66	1.266 -18.157 -14.548 1.00	0.00
ATOM	572	C	GLU	66	4.748 -14.379 -14.856 1.00	0.00
ATOM		0		66	5.523 -14.259 -13.906 1.00	
ATOM	574	N	ASP	67	3.979 -13.379 -15.301 1.00	0.00
ATOM	575	CA	ASP	67	3.982 -12.049 -14.704 1.00	0.00
ATOM	576	CB	ASP	67	3.152 -11.096 -15.573 1.00	0.00
ATOM	577	CG	ASP	67	3.255 -9.653 -15.090 1.00	0.00
ATOM	578		ASP	67	2.234 -9.140 -14.582 1.00	0.00
ATOM	579		ASP	67	4.351 -9.075 -15.263 1.00	0.00
ATOM	580	C.		67	3.462 -12.104 -13.265 1.00	0.00
ATOM	581		ASP	67	2.386 -12.721 -13.106 1.00	0.00
ATOM	582		ASP	67	4.338 -12.034 -12.374 1.00	0.00
ATOM	583	05'	GUA	68	-7.104 -40.147 11.857 1.00	0.00
ATOM	584	C5'	GUA	68	-6.722 -40.799 10.664 1.00	0.00
ATOM	585	C4'	GUA	68	-7.061 -39.934 9.449 1.00	0.00
ATOM	586	04'	GUA	68	-8.429 -39.569 9.441 1.00	0.00
ATOM	587	C1'	GUA	68	-8.577 -38.552 8.474 1.00	0.00
ATOM	588	N9	GUA	68	-9.803 -37.753 8.668 1.00	0.00
ATOM	-589	C8	GUA	68	-10.231 -37.131 9.810 1.00	0.00
ATOM	590	N7	GUA		-11.367 -36.504 9.684 1.00	0.00
M I OM	330	111	oon	00	11.007 00.004 0.004 1.00	0.00

771 772 ATOM 591 C5 GUA 68 -11.703 -36.692 8.346 1.00 0.00 592 C6 GUA -12.828 -36.227 7.600 1.00 0.00 ATOM 68 ATOM 593 06 GUA 68 -13.817 -35.625 8.013 1.00 0.00 ATOM 594 N1 GUA 68 -12.727 -36.5266.246 1.00 0.00 ATOM 595 C2GUA 68 -11.688 -37.233 5.676 1.00 0.00 N2 **GUA** -11.714 -37.427 4.356 1.00 0.00 ATOM 596 68 ATOM 597 N3**GUA** 68 -10.655 -37.713 6.380 1.00 0.00 **ATOM** 598 C4GUA 68 -10.719 -37.408 7.704 1.00 0.00 ATOM 599 C3' GUA 68 -6.318 -38.5919.417 1.00 0.00 C2' GUA -7.344 -37.703 8.712 1.00 ATOM 600 68 0.00 ATOM 601 03' GUA 68 -5.096 -38.722 8.706 1.00 0.00 602 P THY -4.146 -37.460 8.328 1.00 ATOM 69 0.00 ATOM 603 OP1 THY 69 -2.849 -37.991 7.855 1.00 0.00 OP2 THY ATOM 604 -4.182 -36.494 9.449 1.00 0.00 69 05' THY ATOM 605 69 -4.898 -36.790 7.065 1.00 0.00 C5' THY ATOM 606 69 -5.277 -37.573 5.947 1.00 0.00 ATOM 607 C4' THY 69 -6.329 -36.861 5.085 1.00 0.00 04' THY ATOM 608 69 -7.515 -36.474 5.739 1.00 0.00 ATOM 609 C1' THY 69 -8.077 -35.368 5.072 1.00 0.00 N1 THY -9.042 -34.692 ATOM 610 69 5.978 1.00 0.00 ATOM 611 **C6** THY 69 -8.741 -34.565 7.313 1.00 0.00 **ATOM** 612 C5 THY 69 -9.593 -33.957 8.174 1.00 0.00 THY ATOM 613 C7 69 -9.136 -33.838 9.616 1.00 0.00 THY ATOM 614 C4 69 -10.870 -33.438 7.729 1.00 0.00 ATOM 615 04 THY 69 -11.698 -32.872 8.437 1.00 0.00 ATOM N3THY -11.115 -33.628 6.380 1.00 0.00 616 69 C2THY ATOM 617 69 -10.250 -34.216 5.467 1.00 0.00 02 THY -10.558 -34.294 1.00 0.00 ATOM 618 69 4.281 C3' ATOM 619 THY 69 -5.794 -35.589 4.422 1.00 0.00 C2' THY ATOM 620 69 -6.824 -34.536 4.828 1.00 0.00 03' THY -5.714 -35.742 1.00 ATOM 621 69 3.016 0.00 ATOM 622 P THY -4.864 -34.715 2.107 1.00 0.00 70 OP1 THY ATOM 623 70 -3.963 -33.962 2.998 1.00 0.00 ATOM 624 OP2 THY 70 -4.271 -35.489 0.989 1.00 0.00 05' THY ATOM 625 70 -5.953 -33.6681.556 1.00 0.00 ATOM 626 C5' THY 70 -6.983 -34.031 0.660 1.00 0.00 C4' THY 627 70 -8.096 -32.976 0.720 1.00 0.00 ATOM ATOM 628 04' THY 70 -8.626 -32.891 2.029 1.00 0.00 ATOM 629 C1' THY 70 -9.332 -31.674 2.121 1.00 0.00 N1 ATOM 630 THY 70 -9.626 -31.317 3.535 1.00 0.00 C6THY 70 -8.640 -31.403 4.487 1.00 0.00 ATOM 631 ATOM 632 C5 THY 70 -8.879 -31.061 5.777 1.00 0.00 **C7** THY -7.705 -31.185 1.00 **ATOM** 633 70 6.723 0.00 **C4** THY -10.179 -30.601 1.00 0.00 ATOM 634 70 6.213 ATOM 635 04 THY 70 -10.465 -30.246 7.352 1.00 0.00 N3 THY ATOM 636 70 -11.133 -30.5885.210 1.00 0.00 ATOM 637 C2 THY 70 -10.908 -30.8753.872 1.00 0.00 02 THY 638 70 -11.800 -30.705 3.046 1.00 0.00 ATOM ATOM 639 C3' THY 70 -7.637 -31.542 0.407 1.00 0.00 640 C2' THY -8.362 -30.694 ATOM 70 1.465 1.00 0.00

	773				(000)				774	1 3
ATOM	641	03'	THY	70	_7 097	-31.196	-0 022	1.00	0.00	
ATOM	642		ADE	71		-29.806	-1.599	1.00	0.00	
ATOM	643	0P1		71			-1.022		0.00	
	644			71		-29.428		1.00		
ATOM		0P2				-29.928	-3.065	1.00	0.00	
ATOM	645	05'		71		-28.747	-1.068	1.00	0.00	•
ATOM	646		ADE	71		-28.699	-1.573	1.00	0.00	
ATOM	647		ADE	71	-10.724		-0.805	1.00	0.00	
ATOM	648		ADE	71	-11.075		0.497	1.00	0.00	
ATOM	649		ADE	71	-10.913		1.407	1.00	0.00	
ATOM	650	N9	ADE	71	-10.766		2.834	1.00	0.00	
ATOM	651		ADE	71		-27.932	3.432	1.00	0.00	
ATOM	652	N7	ADE	71		-27.897	4.730	1.00	0.00	
ATOM	653	C5	ADE	71		-27.346	5.026	1.00	0.00	
ATOM	654	C6	ADE	71	-11.474		6.246	1.00	0.00	
ATOM	655	N6	ADE	71		-27.212	7.409	1.00	0.00	
ATOM	656	N1	ADE	71		-26.405	6.230	1.00	0.00	
ATOM	657	C2	ADE	71		-26.171	5.052	1.00	0.00	
ATOM	658	N3	ADE	71		-26.441	3.833	1.00	0.00	
ATOM	659	C4	ADE	71		-27.046	3.885	1.00	0.00	
ATOM	660	C3'	ADE	71		-26.351		1.00	0.00	
ATOM	661	C2'	ADE	71		-26.535	0.887	1.00	0.00	
ATOM	662	03'	ADE	71		-25.223	-0.778	1.00	0.00	
ATOM	663	P	GUA	72		-23.698	-0.735	1.00	0.00	
ATOM	664		GUA	72		-23.237	-2.107	1.00	0.00	
ATOM	665		GUA	72		-23.515	0.348	1.00	0.00	
ATOM	666		GUA	72		-22.983	-0.217	1.00	0.00	
ATOM	667	C5'	GUA	72		-23.255	-0.753	1.00	0.00	
ATOM	668	C4'	GUA	72		-22.735	0.223	1.00	0.00	
ATOM	669	04'	GUA	72		-23.390	1.483	1.00	0.00	
ATOM	670	C1'	GUA	72		-22.473		1.00	0.00	
ATOM	671	N9	GUA	72		-23.040		1.00	0.00	
ATOM	672	C8	GUA	72		-23.628		1.00	0.00	
ATOM	673	N7	GUA	72		-23.937	4.089	1.00	0.00	
ATOM	674	C5	GUA	72		-23.580	5.197	1.00	0.00	
ATOM	675	C6	GUA	72		-23.745	6.584	1.00	0.00	
ATOM	676	06	GUA	72 72		-24.204		1.00	0.00	
ATOM	677	N1	GUA	72 72		-23.325	7.397	1.00		
ATOM	678	C2	GUA	72		-22.787		1.00		
ATOM	679	N2	GUA	72 70		-22.378	7.840	1.00		
ATOM	680	N3	GUA	72		-22.616	5.631	1.00		
ATOM	681	C4	GUA	72 70		-23.043		1.00		
ATOM	682	C3'	GUA	72 72		-21.242		1.00		
ATOM	683	C2'	GUA	72 70		-21.273		1.00		
ATOM	684	03'	GUA	72 72		-20.628	0.613	1.00		
ATOM	685	P	GUA	73		-19.024	0.660	1.00		
ATOM	686		GUA	73		-18.403	-0.075	1.00		
ATOM	687		GUA	73 72		-18.699	0.284	1.00		
ATOM	688	05'				-18.714		1.00		
ATOM	689		GUA			-19.097		1.00		
ATOM	690	U4	GUA	73	-15.42/	-18.861	4.582	1.00	0.00	

```
775
                                                                    776
ATOM
        691 04'
                 GUA
                         73
                                 -14.285 -19.657
                                                   4.844 1.00 0.00
        692
             C1'
                  GUA
                                -13.459 -18.935
                                                   5.725
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
                         73
        693
             N9
                  GUA
                         73
                                 -12.097 -19.506
                                                   5.761
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        694
             68
                  GUA
                         73
                                 -11.231 -19.721
                                                    4.725
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
        695
             N7
                  GUA
                         73
                                -10.104 -20.285
                                                    5.063
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  GUA
ATOM
        696
             C5
                         73
                                 -10.226 -20.444
                                                    6.442 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        697
             60
                  GUA
                         73
                                  -9.318 -21.003
                                                    7.391
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        698
             06
                  GUA
                         73
                                  -8.191 -21.447
                                                    7.181
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        699
             N1
                  GUA
                         73
                                  -9.844 -21.024
                                                    8.680
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        700
             C2
                  GUA
                         73
                                 -11.096 -20.548
                                                    9.022
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        701
              N2
                  GUA
                         73
                                 -11.467 -20.592
                                                   10.301
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        702
              N3
                  GUA
                         73
                                 -11.936 -20.001
                                                    8.138
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        703
              C4
                  GUA
                         73
                                 -11.447 -19.980
                                                    6.873
                                                          1.00
                                                                 0.00
              C3'
                  GUA
ATOM
        704
                         73
                                 -15.005 -17.405
                                                    4.854
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C2'
                  GUA
ATOM
        705
                         73
                                 -13.498 -17.562
                                                    5.069
                                                          1.00 0.00
              03'
                  GUA
ATOM
        706
                         73
                                 -15.687 -16.967
                                                    6.017
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        707
              P
                  GUA
                         74
                                 -15.561 -15.470
                                                    6.606
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OP1 GUA
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        708
                         74
                                 -16.922 -14.904
                                                    6.736
              OP2 GUA
ATOM
        709
                         74
                                 -14.522 -14.732
                                                    5.855
                                                           1.00
                                                                 0.00
        710
              05'
                 GUA
                         74
                                 -14.996 -15.777
                                                    8.081
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C5'
ATOM
                  GUA
                                 -15.783 -16.476
                                                    9.027
                                                           1.00
                                                                  0.00
        711
                         74
ATOM
              C4'
                  GUA
                                 -14.991 -16.733
                                                   10.312
                                                           1.00
                                                                  0.00
        712
                         74
              04'
                  GUA
ATOM
        713
                                 -13.804 -17.446
                                                    9.999
                                                           1.00
                                                                  0.00
                         74
              C1'
                  GUA
ATOM
        714
                         74
                                 -12.677 -16.777
                                                   10.525
                                                           1.00
                                                                  0.00
              N9
                  GUA
ATOM
        715
                         74
                                 -11.511 -16.983
                                                    9.636
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              C8
                  GUA
                                                           1.00
                                                                  0.00
        716
                         74
                                 -11.396 -16.689
                                                    8.301
              N7
                  GUA
                                                           1.00
ATOM
        717
                         74
                                 -10.249 -17.016
                                                    7.774
                                                                  0.00
              C5
                  GUA
                                  -9.547 -17.573
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        718
                          74
                                                    8.836
ATOM
        719
              60
                  GUA
                                  -8.234 -18.133
                                                    8.877
                                                           1.00
                                                                  0.00
                         74
ATOM
        720
              06
                  GUA
                         74
                                  -7.433 - 18.244
                                                    7.954
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        721
              N1
                  GUA
                         74
                                  -7.893 -18.595
                                                   10.143
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C2
                  GUA
                                  -8.723 -18.545
ATOM
         722
                         74
                                                   11.244
                                                          1.00
                                                                  0.00
ATOM
         723
              N2
                  GUA
                          74
                                  -8.237 -18.953
                                                   12.417
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              N3
                  GUA
                                  -9.958 -18.030
                                                   11.203
                                                           1.00
                                                                  0.00
         724
                          74
ATOM
         725
              C4
                  GUA
                          74
                                 -10.312 -17.561
                                                    9.978
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         726
              C3'
                  GUA
                          74
                                 -14.556 -15.440
                                                  11.016
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C2' GUA
                          74
                                 -13.108 -15.314
                                                   10.555
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         727
ATOM
         728
              03'
                  GUA
                                 -14.689 -15.620
                                                   12.417
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          74
ATOM
              P
                  THY
                                                           1.00
                                                                  0.00
         729
                          75
                                 -14.328 -14.462
                                                   13.482
              OP1 THY
ATOM
         730
                          75
                                 -14.257 -13.164
                                                   12.775
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         731
              OP2 THY
                          75
                                 -15.220 -14.615
                                                   14.652
                                                           1.00
                                                                  0.00
              05'
                  THY
ATOM
         732
                          75
                                 -12.838 -14.878
                                                   13.924
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         733
              C5'
                  THY
                          75
                                 -12.608 -16.072
                                                   14.648
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C4'
ATOM
         734
                  THY
                          75
                                 -11.109 -16.283
                                                   14.862
                                                           1.00
                                                                  0.00
              04'
                  THY
                                 -10.437 -16.316
ATOM
         735
                          75
                                                   13.616
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C1'
                  THY
                                  -9.137 -15.801
                                                   13.791
                                                                  0.00
ATOM
         736
                          75
                                                           1.00
ATOM
              N1
                  THY
                                  -8.542 -15.420
                                                   12.479
                                                           1.00
                                                                  0.00
         737
                          75
              C6
                  THY
ATOM
         738
                          75
                                  -9.287 -14.727
                                                   11.551
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         739
              C5
                  THY
                          75
                                  -8.812 -14.491
                                                   10.301
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         740
             C7 THY
                          75
                                  -9.720 -13.713
                                                    9.366 1.00 0.00
```

```
777
                                                                    778
ATOM
        741 C4
                 THY
                         75
                                 -7.505 -14.961
                                                    9.884 1.00 0.00
ATOM
        742
             04
                 THY
                         75
                                 -7.018 -14.856
                                                   8.761
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        743 N3
                  THY
                         75
                                 -6.799 -15.596
                                                   10.888
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
        744
             C2
                         75
                                 -7.251 -15.854
                                                   12.173
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        745
             02
                 THY
                         75
                                 -6.527 - 16.445
                                                  12.968
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
       ·746
             C3'
                         75
                                 -10.443 -15.162
                                                   15.676
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        747
             C2'
                 THY
                         75
                                 -9.432 -14.593
                                                  14.674
                                                           1.00
                                                                 0.00
             03'
                 THY
ATOM
        748
                         75
                                  -9.851 -15.748
                                                   16.824
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        749 P
                  THY
                         76
                                  -8.997 -14.909
                                                   17.908
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP1 THY
ATOM
        750
                         76
                                  -9.081 -13.466
                                                   17.589
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        751
             OP2 THY
                         76
                                  -9.356 -15.391
                                                   19.260
                                                           1.00
                                                                 0.00
             05'
        752
                  THY
ATOM
                         76
                                  -7.509 -15.412
                                                  17.570
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C5'
                 THY
ATOM
        753
                         76
                                  -7.163 -16.779
                                                  17.693
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C4'
                  THY
                                                                 0.00
ATOM
        754
                         76
                                  -5.727 -17.000
                                                   17.219
                                                           1.00
                  THY
ATOM
        755
             04'
                         76
                                  -5.601 -16.499
                                                  15.901
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C1'
                  THY
ATOM
        756
                         76
                                  -4.420 -15.740
                                                  15.777
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
        757
             N1
                         76
                                  -4.605 -14.747
                                                  14.678
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                  -5.654 -13.853
                  THY
                                                   14.713
ATOM
        758
             С6
                         76
                                                           1.00
                                                                  0.00
             C5
                  THY
ATOM
        759
                         76
                                  -5.958 -13.078
                                                   13.639
                                                           1.00
                                                                  0.00
             C7
                  THY
                                                   13.788
ATOM
        760
                         76
                                  -7.119 -12.111
                                                           1.00
                                                                  0.00
             C4
                  THY
                         76
ATOM
        761
                                  -5.213 -13.172
                                                  12.401
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  THY
ATOM
        762
             04
                                  -5.459 -12.564
                                                   11.360
                                                           1.00
                                                                  0.00
                         76
                  THY
ATOM
        763
             N3
                         76
                                  -4.152 -14.057
                                                   12.456
                                                           1.00
                                                                  0.00
        764
             C2
                  THY
                         76
                                                  13.545
ATOM
                                  -3.796 -14.840
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        765
             02
                  THY
                         76
                                  -2.804 -15.565
                                                  13.479
                                                                  0.00
                                                          1.00
ATOM
              C3'
                  THY
        766
                         76
                                  -4.700 -16.255
                                                   18.083
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        767
             C2'
                  THY
                         76
                                  -4.262 -15.112
                                                   17.163
                                                           1.00
                                                                  0.00
        768
              03'
                  THY
                                  -3.655 -17.155
ATOM
                         76
                                                   18.416
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        769
             P
                  ADE
                         77
                                  -2.486 -16.782
                                                   19.464
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                                                  0.00
ATOM
        770
             OP1 ADE
                                  -2.948 -15.691
                                                   20.347
                                                           1.00
                         77
ATOM
        771
              OP2 ADE
                                  -1.974 -18.042
                                                   20.051
                                                           1.00
                                                                  0.00
                         77
ATOM
        772
              05'
                  ADE
                         77
                                  -1.350 -16.206
                                                   18.489
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        773
              C5'
                  ADE
                         77
                                  -0.607 -17.088
                                                   17.679
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        774
              C4'
                  ADE
                         77
                                   0.293 - 16.315
                                                   16.722
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        775
              04'
                  ADE
                         77
                                  -0.468 -15.542
                                                   15.814
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        776
              C1'
                  ADE
                         77
                                   0.275 - 14.393
                                                   15.472
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        777
              N9
                  ADE
                         77
                                  -0.610 -13.394
                                                   14.828
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         778
              С8
                  ADE
                         77
                                  -1.785 -12.869
                                                   15.307
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         779
              N7
                  ADE
                         77
                                  -2.442 -12.142
                                                   14.448
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
        780
              C5
                  ADE
                                                   13.325
                          77
                                  -1.623 -12.152
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  ADE
                                                           1.00
ATOM
         781
              60
                          77
                                  -1.741 -11.558
                                                   12.054
                                                                  0.00
              N6
                  ADE
ATOM
         782
                          77
                                  -2.821 -10.856
                                                   11.703
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         783
              N1
                  ADE
                                  -0.736 -11.709
                                                   11.169
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          77
              C2
                  ADE
                                                   11.529
                                                                  0.00
ATOM
         784
                          77
                                   0.322 - 12.433
                                                           1.00
ATOM
         785
              N3
                  ADE
                                   0.530 - 13.091
                                                   12.669
                                                                  0.00
                          77
                                                           1.00
              C4
                  ADE
ATOM
         786
                          77
                                  -0.490 -12.891
                                                   13.550
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              C3'
                  ADE
                                   1.267 -15.334
                                                   17.394
         787
                          77
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         788
              C2'
                  ADE
                          77
                                   0.774 -13.985
                                                   16.855
                                                            1.00
                                                                  0.00
              03'
                  ADE
ATOM
         789
                          77
                                   2.552 -15.718
                                                   16.941
                                                           1.00
                                                                  0.00
             P
ATOM
         790
                  GUA
                          78
                                   3.896 -14.903 17.254 1.00
                                                                 0.00
```

```
779
                                                                    780
ATOM
        791
             OP1 GUA
                         78
                                   3.803 -14.201 18.555 1.00 0.00
             OP2 GUA
                                   5.030 -15.815
                                                  17.017
ATOM
        792
                         78
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        793
             05'
                  GUA
                         78
                                   3.895 -13.803
                                                  16.096
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        794
             C5'
                  GUA
                         78
                                   4.882 -13.772
                                                   15.084
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        795
             C4'
                  GUA
                         78
                                   5.067 -12.308
                                                   14.704
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  GUA
ATOM
        796
             04'
                         78
                                   3.853 -11.788
                                                  14.210
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        797
             C1'
                  GUA
                         78
                                   3.769 -10.434
                                                  14.582
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  GUA
ATOM
        798
              N9
                         78
                                   2.361 -10.007
                                                   14.442
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        799
              68
                  GUA
                         78
                                   1.260 -10.381
                                                   15.174
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        800
             N7
                  GUA
                                         -9.960
                                                   14.689
                                                           1.00
                         78
                                   0.128
                                                                  0.00
ATOM
        801
              C5
                  GUA
                         78
                                   0.497 - 9.257
                                                   13.548
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        802
              C6
                  GUA
                         78
                                  -0.304 -8.560
                                                   12.596
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        803
              06
                  GUA
                         78
                                  -1.522 -8.406
                                                   12.601
                                                           1.00
                                                                  0.00
              N1
                                         -7.986
ATOM
        804
                  GUA
                         78
                                   0.455
                                                   11.582
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        805
              C2
                  GUA
                         78
                                   1.833
                                          -8.044
                                                   11.512
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        806
              N2
                  GUA
                          78
                                   2.439
                                          -7.414
                                                   10.504
                                                                  0.00
                                                           1.00
ATOM
        807
              N3
                  GUA
                          78
                                   2.588
                                          -8.688
                                                   12.409
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        808
              C4
                  GUA
                                   1.861 -9.273
                                                   13.397
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          78
ATOM
        809
              C3'
                  GUA
                          78
                                   5.411 -11.470
                                                   15.946
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        810
              C2'
                  GUA
                          78
                                   4.269 -10.454
                                                   16.023
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              03'
                  GUA
                                   6.709 -10.931
                                                   15.796
                                                           1.00
                                                                  0.00
        811
                          78
ATOM
        812
              P
                  GUA
                                   7.459 -10.180
                                                   17.005
                          79
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         813
              OP1 GUA
                          79
                                   6.900 -10.696
                                                   18.280
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         814
              OP2 GUA
                          79
                                   8.915 -10.255
                                                   16.762
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         815
              05'
                  GUA
                                   6.969
                                          -8.666
                                                   16.752
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          79
              C5'
                  GUA
ATOM
         816
                          79
                                   7.421
                                          -7.963
                                                   15.607
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         817
              C4'
                  GUA
                          79
                                   6.501
                                          -6.795
                                                   15.245
                                                           1.00
                                                                  0.00
              04'
                  GUA
                          79
                                          -7.210
                                                   15.075
ATOM
         818
                                   5.161
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         819
              C1'
                  GUA
                                          -6.043
                                                   15.105
                          79
                                   4.372
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         820
              N9
                  GUA
                          79
                                   2.942
                                          -6.375
                                                   15.301
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         821
              С8
                  GUA
                          79
                                   2.389
                                          -7.163
                                                   16.278
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              N7
                  GUA
                                          -7.224
         822
                          79
                                   1.088
                                                   16.243
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         823
              C5
                  GUA
                          79
                                   0.747
                                          -6.442
                                                   15.144
                                                                  0.00
                                                           1.00
ATOM
         824
              60
                  GUA
                          79
                                  -0.536
                                          -6.156
                                                   14.585
                                                            1.00
                                                                  0.00
              06
ATOM
         825
                  GUA
                          79
                                  -1.639
                                           -6.499
                                                   15.001
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
              N1
                  GUA
                          79
                                  -0.454
                                          -5.402
                                                   13.418
         826
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              C2
                  GUA
                          79
                                   0.726
                                           -4.949
                                                   12.867
         827
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         828
              N2
                  GUA
                          79
                                   0.640
                                          -4.254
                                                   11.731
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         829
              N3
                  GUA
                          79
                                   1.931
                                           -5.183
                                                   13.409
                                                            1.00
                                                                  0.00
                  GUA
                                          -5.942
ATOM
         830
              C4
                          79
                                   1.877
                                                   14.540
                                                            1.00
                                                                  0.00
              C3'
                  GUA
                                           -5.675
ATOM
         831
                          79
                                   6.449
                                                   16.292
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         832
              C2'
                  GUA
                                   4.954
                                           -5.323
                                                   16.320
                          79
                                                            1.00
                                                                  0.00
              03'
                  GUA
                                          -4.628
                                                   15.854
ATOM
         833
                          79
                                   7.302
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         834
              P
                   GUA
                          80
                                   7.441
                                          -3.219
                                                   16.628
                                                            1.00
                                                                  0.00
              OP1 GUA
                                          -3.412
ATOM
         835
                          80
                                   7.073
                                                   18.048
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         836
              OP2 GUA
                          80
                                   8.747
                                          -2.621
                                                   16.275
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         837
              05'
                  GUA
                          80
                                   6.288
                                          -2.346
                                                   15.918
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         838
              C5'
                  GUA
                                   6.338
                                          -2.069
                          80
                                                   14.531
                                                            1.00
                                                                  0.00
ATOM
         839
              C4'
                  GUA
                          80
                                   5.013
                                           -1.461
                                                   14.069
                                                            1.00
                                                                  0.00
              04' GUA
                                          -2.342
ATOM
         840
                          80
                                   3.944
                                                  14.366
                                                           1.00 0.00
```

					(392)				特開2
	781								782
ATOM	841	C1'	GUA	80	2.820	-1.564	14.706	1.00	0.00
ATOM	842	N9	GUA	80	1.801	-2.359	15.425	1.00	0.00
ATOM	843	С8	GUA	80	1.941	-3.091	16.575	1.00	0.00
ATOM	844	N7	GUA	80	0.833	-3.617	17.013	1.00	0.00
ATOM	845	C5	GUA	80	-0.117	-3.215	16.080	1.00	0.00
ATOM	846	C6	GUA	80	-1.520	-3.475	16.021	1.00	0.00
ATOM	847	06	GUA	80	-2.213	-4.101	16.820	1.00	0.00
ATOM	848	N1	GUA	80	-2.109	-2.934	14.885	1.00	0.00
ATOM	849	C2	GUA	80	-1.443	-2.202	13.926	1.00	0.00
ATOM	850	N2	GUA	80	-2.152	-1.747	12.891	1.00	0.00
ATOM	851	N3	GUA	80	-0.132	-1.928	13.995	1.00	0.00
ATOM	852	C4	GUA	80	0.472	-2.465	15.089	1.00	0.00
ATOM	853	C3'	GUA	80	4.673	-0.137	14.773	1.00	0.00
ATOM	854	C2'	GUA	80	3.451	-0.505	15.606	1.00	0.00
ATOM	855	03'	GUA	80	4.314	0.849	13.826	1.00	0.00
ATOM	856	05'	CYT	81	-11.607	-1.478	14.018	1.00	0.00
ATOM	857	C5'	CYT	81	-11.038	-0.288	13.511	1.00	0.00
ATOM	858	C4'	CYT	81	-9.609	-0.533	13.013	1.00	0.00
ATOM	859	04'	CYT	81	-8.787	-1.069	14.026	1.00	0.00
ATOM	860	C1'	CYT	81	-7.663	-1.631	13.384	1.00	0.00
ATOM	861	N1	CYT	81	-6.945	-2.564	14.284	1.00	0.00
ATOM	862	C6	CYT	81	-7.649	-3.464	15.044	1.00	0.00
ATOM	863	C5	CYT	81	-7.025	-4.371	15.826	1.00	0.00
ATOM	864	C4	CYT	81	-5.590	-4.335	15.844	1.00	0.00
ATOM	865	N4	CYT	81	-4.899	-5.181	16.610	1.00	0.00
ATOM	866	N3	CYT	81	-4.910	-3.475	15.078	1.00	0.00
ATOM	867	C2	CYT	81	-5.552	-2.587	14.270	1.00	0.00
ATOM	868	02	CYT	81	-4.899	-1.842	13.541	1.00	0.00
ATOM	869	C3'	CYT	81	-9.522	-1.553	11.869	1.00	0.00
ATOM	870	C2'	CYT	81	-8.296	-2.395	12.229	1.00	0.00
ATOM	871	03'	CYT	81	-9.394	-0.853	10.644	1.00	0.00
ATOM	872	P	CYT	82	-9.325	-1.605	9.219	1.00	0.00
ATOM	873	0P1	CYT	82	-9.878	-0.691	8.197	1.00	0.00
ATOM	874	0P2	CYT	82	-9.897	-2.959	9.383	1.00	0.00
ATOM	875	05'	CYT	82	-7.738	-1.760	8.967	1.00	0.00
ATOM	876	C5'	CYT	82	-6.928	-0.649	8.620	1.00	0.00
ATOM	877	C4'	CYT	82	-5.504	-1.104	8.273	1.00	0.00
ATOM	878	04'	CYT	82	-4.875	-1.676	9.402	1.00	0.00
ATOM	879	C1'	CYT	82	-4.105	-2.803	9.032	1.00	0.00
ATOM	880	N1	CYT	82	-4.084	-3.715	10.206	1.00	0.00
ATOM	881	C6	CYT	82	-5.275	-4.078	10.776	1.00	0.00
ATOM	882	C5	CYT	82	-5.337	-4.852	11.876	1.00	0.00
ATOM	883	C4	CYT	82	-4.087	-5.278	12.438	1.00	0.00
ATOM	884	N4	CYT	82	-4.076	-6.107	13.484	1.00	0.00
ATOM	885	N3	CYT	82	-2.916	-4.888	11.910	1.00	0.00
ATOM	886	C2	CYT	82	-2.876	-4.106	10.790	1.00	0.00
ATOM	887	02	CYT	82	-1.792	-3.767	10.317	1.00	0.00
ATOM	888	C3'	CYT	82	-5.491	-2.176	7.173	1.00	0.00
ATOM	889	C2'	CYT	82	-4.893	-3.401	7.864	1.00	0.00
ATOM	890	03'	CYT	82	-4.723	-1.696	6.080	1.00	0.00

	783								784
ATOM	891	P	CYT	83	-4.756	-2.395	4.623	1.00	0.00
ATOM	892	0P1	CYT	83	-6.009	-3.169	4.497	1.00	0.00
ATOM	893	0P2	CYT	83	-4.421	-1.366	3.613	1.00	0.00
ATOM	894	05'	CYT	83	-3.533	-3.433	4.713	1.00	0.00
ATOM	895	C5*	CYT	83	-2.224	-3.074	4.309	1.00	0.00
ATOM	896	C4'	CYT	83	-1.245	-4.184	4.701	1.00	0.00
ATOM	897	04'	CYT	83	-1.281	-4.359	6.102	1.00	0.00
ATOM	898	C1'	CYT	83	-0.761	-5.631	6.429	1.00	0.00
ATOM	899	N1	CYT	83	-1.530	-6.193	7.567	1.00	0.00
ATOM	900	C6	CYT	83	-2.895	-6.253	7.496	1.00	0.00
ATOM	901	C5	CYT	83	-3.642	-6.749	8.505	1.00	0.00
ATOM	902	C4	CYT	83	-2.932	-7.248	9.647	1.00	0.00
ATOM	903	N4	CYT	83	-3.590	-7.808	10.663	1.00	0.00
ATOM	904	N3	CYT	83	-1.595	-7:187	9.715	1.00	0.00
ATOM	905	C2	CYT	83	-0.863	-6.654	8.697	1.00	0.00
ATOM	906	02	CYT	83	0.359	-6.596	8.789	1.00	0.00
ATOM	907	C3'	CYT	83	-1.637	-5.559	4.158	1.00	0.00
ATOM	908	C2'	CYT	83	-0.972	-6.484	5.177	1.00	0.00
ATOM	909	03'	CYT	83	-1.162	-5.768	2.841	1.00	0.00
ATOM	910	P	THY	84	-1.537	-7.100	1.999	1.00	0.00
ATOM	911	0P1	THY	84	-1.154	-6.873	0.587	1.00	0.00
ATOM	912	0P2	THY	84	-2.926	-7.489	2.331	1.00	0.00
ATOM	913	05'	THY	84	-0.558	-8.224	2.605	1.00	0.00
ATOM	914	C5'	THY	84	0.846	-8.138	2.453	1.00	0.00
ATOM	915	C4'	THY	84	1.516	-9.278	3.224	1.00	0.00
ATOM	916	04'	THY	84	1.014	-9.312	4.551	1.00	0.00
ATOM	917	C1'	THY	84	0.733	-10.640	4.939	1.00	0.00
ATOM	918	N1	THY	84	-0.334	-10.628	5.983	1.00	0.00
ATOM	919	C6	THY	84	-1.566	-10.085	5.698	1.00	0.00
ATOM	920	C5	THY	84	-2.531	-9.990	6.644	1.00	0.00
ATOM	921	<b>C7</b>	THY	84	-3.857	-9.414	6.179	1.00	0.00
ATOM	922	C4	THY	84	-2.306	-10.427	8.004	1.00	0.00
ATOM	923	04	THY	84	-3.120	-10.355	8.917	1.00	0.00
ATOM	924	N3	THY	84	-1.045	-10.960	8.226	1.00	0.00
ATOM	925	C2	THY	84	-0.039	-11.084	7.273	1.00	0.00
ATOM	926	02	THY	84	1.043	-11.572	7.587	1.00	0.00
ATOM	927	C3'	THY	84	1.239	-10.657	2.606	1.00	0.00
ATOM	928	C2'	THY	84	0.288	-11.290	3.625	1.00	0.00
ATOM	929	03'	THY	84	2.471	-11.343	2.458	1.00	0.00
ATOM	930	P	ADE	85	2.584	-12.790	1.750	1.00	0.00
ATOM	931	0P1	ADE	85	1.464	-12.948	0.796	1.00	0.00
ATOM	932		ADE	85	3.977	-12.982	1.289	1.00	0.00
ATOM	933	05'		85		-13.775	2.992	1.00	0.00
ATOM	934	C5'	ADE	85		-13.836	4.059	1.00	0.00
ATOM	935	C4	ADE	85		-14.609	5.225	1.00	0.00
ATOM	936	04'	ADE	85		-13.983	5.690	1.00	0.00
ATOM	937	C1'	ADE	85		-14.966	6.356	1.00	0.00
ATOM	938	N9	ADE	85		-14.488	6.592	1.00	0.00
ATOM	939	C8	ADE	85		-13.981	5.686	1.00	0.00
ATOM	940	N7	ADE	85	-2.695	-13.573	6.211	1.00	0.00

	<b>505</b>				(334)			17 JH Z U
	785							786
MOTA	941	C5	ADE	. 85	-2.531 -13.825	7.567	1.00	0.00
ATOM	942	C6	ADE	85	-3.348 -13.596	8.694	1.00	0.00
ATOM	943	N6	ADE	85	-4.565 -13.051	8.631	1.00	0.00
ATOM	944	N1	ADE	85	-2.868 -13.924	9.903	1.00	0.00
ATOM	945	C2	ADE	85	-1.659 -14.455	9.996	1.00	0.00
ATOM	946	N3	ADE	85	-0.799 -14.742	9.027	1.00	0.00
ATOM	947	C4	ADE	85	-1.301 -14.386	7.812	1.00	0.00
ATOM	948	C3'	ADE	85	2.233 -16.047	4.864	1.00	0.00
ATOM	949	C2'	ADE	85	0.776 - 16.101	5.341	1.00	0.00
ATOM	950	03'	ADE	85	3.113 -16.923	5.545	1.00	0.00
ATOM	951	P	ADE	86	2.992 -18.530	5.495	1.00	0.00
ATOM	952	0P1	ADE	86	1.967 -18.902	4.492	1.00	0.00
ATOM	953	OP2	ADE	86	4.358 -19.083	5.383	1.00	0.00
ATOM	954	05'	ADE	86	2.450 -18.843	6.972	1.00	0.00
ATOM	955	C5'	ADE	86	3.248 -18.486	8.082	1.00	0.00
ATOM	956	C4'	ADE	86	2.563 -18.761	9.415	1.00	0.00
ATOM	957	04'	ADE	86	1.321 -18.081	9.469	1.00	0.00
ATOM	958	C1'	ADE	86	0.257 -18.996	9.660	1.00	0.00
ATOM	959	N9	ADE	86	-0.914 -18.533	8.873	1.00	0.00
ATOM	960	C8	ADE	86	-1.081 -18.499	7.510	1.00	0.00
ATOM	961	N7	ADE	86	-2.176 -17.909	7.114	1.00	0.00
ATOM	962	C5	ADE	86	-2.803 -17.551	8.299	1.00	0.00
ATOM	963	C6	ADE	86	-4.031 -16.920	8.589	1.00	0.00
ATOM	964	N6	ADE	86	-4.872 -16.483	7.649	1.00	0.00
ATOM	965	N1	ADE	86	-4.372 -16.748	9.877	1.00	0.00
ATOM	966	C2	ADE	86	-3.539 -17.152	10.827	1.00	0.00
ATOM	967	N3	ADE	86	-2.339 -17.709	10.692	1.00	0.00
ATOM	968	C4	ADE	86	-2.036 -17.915	9.379	1.00	0.00
ATOM	969	C3'	ADE	86	2.262 -20.228	9.722	1.00	0.00
ATOM	970	C2'	ADE	86	0.821 -20.350	9.228	1.00	0.00
ATOM	971	03'	ADE	86	2.416 -20.359	11.125	1.00	0.00
ATOM	972	P	CYT	87	2.329 -21.762	11.900	1.00	0.00
ATOM	973	0P1	CYT	. 87	3.250 -21.698	13.057	1.00	0.00
ATOM	974	0P2	CYT	87	2.454 -22.861	10.916	1.00	0.00
ATOM	975	05'	CYT	87	0.824 -21.699	12.469	1.00	0.00
ATOM	976	C5'	CYT	87	0.535 - 20.876	13.586	1.00	0.00
ATOM	977	C4'	CYT	87	-0.968 -20.702	13.808	1.00	0.00
ATOM	978	04'	CYT	87	-1.603 -20.269	12.626	1.00	0.00
ATOM	979	C1'	CYT	87	-2.958 -20.654	12.696	1.00	0.00
ATOM	980	N1	CYT	87	-3.572 -20.618	11.345	1.00	0.00
ATOM	981	C6	CYT	87	-2.871 -21.056	10.246	1.00	0.00
ATOM	982	C5	CYT	87	-3.361 -20.909	8.993	1.00	0.00
ATOM	983	C4	CYT	87	-4.639 -20.269	8.866	1.00	0.00
ATOM	984	N4	CYT	87	-5.138 -19.988	7.666	1.00	0.00
ATOM	985	N3	CYT	87	-5.334 -19.888	9.943	1.00	0.00
ATOM	986	C2	CYT	87	-4.842 -20.062	11.197	1.00	0.00
ATOM	987	02	CYT	87	-5.514 -19.718	12.165	1.00	0.00
ATOM	988	C3'	CYT	87	-1.712 -21.970	14.251	1.00	0.00
ATOM	989	C2'	CYT	87	-2.848 -22.073	13.234	1.00	0.00
ATOM	990	03'	CYT	87	-2.154 -21.765	15.586	1.00	0.00

787 **ATOM** 991 P CYT 88 -2.879 -22.914 1.00 0.00 16.456 ATOM 992 OP1 CYT 88 -2.419 -24.230 15.967 OP2 CYT -2.712 -22.568 17.888 ATOM 993 88 1.0005' CYT -4.431 -22.739 16.073 ATOM 994 88 1.00 C5' CYT -5.187 -21.636 16.545 ATOM 995 88 C4' CYT -6.570 -21.628 15.885 ATOM 996 88 04' CYT ATOM 997 88 -6.433 -21.541 14.483 C1' CYT -7.593 -22.078 ATOM 998 88 13.887 CYT ATOM 999 N1 88 -7.279 -22.468 12.492 C6 CYT 12.222 ATOM 1000 88 -6.105 -23.116 C5 CYT -5.682 -23.335 ATOM 1001 88 10.960 ATOM 1002 C4 CYT 88 -6.543 -22.868 9.906 ATOM 1003 N4 CYT -6.179 -22.970 8.627 88 CYT N3 88 -7.734 -22.316 10.177 ATOM 1004 C2 ATOM 1005 CYT -8.142 -22.120 11.461 88 02 CYT ATOM 1006 88 -9.257 -21.660 11.687 1007 C3' CYT -7.385 -22.907 ATOM 88 16.133 ATOM C2' CYT 1008 88 -7.860 -23.311 14.737 03' **ATOM** 1009 CYT -8.439 -22.606 17.034 88 1010 P ATOM CYT 89 -9.577 -23.675 17.451 1011 OP1 CYT ATOM -9.066 -25.037 17.182 89 1012 OP2 CYT ATOM -10.064 -23.325 18.803 89 05' CYT ATOM 1013 -10.756 -23.365 16.393 89 1014 C5' CYT ATOM 89 -11.455 -22.132 16.407 1015 C4' CYT ATOM 89 -12.473 -22.078 15.261 ATOM 04' CYT 1016 89 -11.810 -22.265 14.028 ATOM 1017 C1' CYT -12.640 -22.970 89 13.130 ATOM 1018 N1 CYT 89 -11.771 -23.728 12.194 ATOM 1019 С6 CYT 89 -10.693 -24.410 12.693 **ATOM** C5 CYT 1020 89 -9.778 -24.989 11.887 C4 CYT ATOM 1021 89 -10.001 -24.871 10.473 ATOM 1022 N4 CYT 89 -9.136 -25.401 9.608 ATOM 1023 N3 CYT 89 -11.087 -24.249 9.989 ATOM 1024 C2CYT 89 -12.002 -23.678 10.823 02 CYT ATOM 10.354 1025 89 -13.003 -23.142 ATOM 1026 C3' CYT 89 -13.541 -23.179 15.352 C2' CYT ATOM 1027 89 -13.399 -23.934 14.033 03' ATOM 1028 CYT 89 -14.815 -22.574 15.522 ATOM 1029 P THY -16.186 -23.424 15.671 90 ATOM 1030 OP1 THY -17.167 -22.591 90 16.402 OP2 THY -15.849 -24.775 ATOM 1031 90 16.173 1.00 0.00 ATOM 1032 05' THY -16.691 -23.568 0.00 90 14.145 1.00 THY **ATOM** 1033 C5' 90 -17.099 -22.439 13.396 1.00 0.00 C4' THY ATOM 1034 90 -17.341 - 22.82611.933 1.00 0.00 ATOM 1035 04' THY -16.166 -23.403 90 11.398 1.00 0.00 10.456 ATOM 1036 C1' THY -16.520 -24.389 0.00 90 1.00 ATOM 1037 N1 THY 90 -15.375 -25.324 10.300 1.00 0.00 C6 THY -14.835 -25.924 ATOM 1038 90 11.413 1.00 0.00 ATOM 1039 C5 THY 90 -13.723 - 26.68911.332 1.00 0.00

ATOM

1040 C7 THY

90

-13.228 -27.317 12.622 1.00

0.00

					(390)				付用とい
	789								790
ATOM	1041	C4	THY	90	-13.045		10.071	1.00	0.00
ATOM	1042	04	THY	90	-12.019		9.927	1.00	0.00
ATOM	1043	N3	THY	90	-13.649		8.990	1.00	0.00
ATOM	1044	C2	THY	90	-14.813		9.038	1.00	0.00
ATOM	1045	02	THY	90	-15.307	-25.077	8.004	1.00	0.00
ATOM	1046	C3'	THY	90	-18.458	-23.865	11.742	1.00	0.00
ATOM	1047	C2'	THY	90	-17.724	-25.055	11.121	1.00	0.00
ATOM	1048	03'	THY	90	-19.453	-23.320	10.890	1.00	0.00
ATOM	1049	P	ADE	91	-20.842	-24.084	10.575	1.00	0.00
ATOM	1050	0P1	ADE	91	-21.163	-24.971	11.715	1.00	0.00
ATOM	1051	0P2	ADE	91	-21.829	-23.077	10.125	1.00	0.00
ATOM	1052	05'	ADE	91	-20.457	-25.008	9.313	1.00	0.00
ATOM	1053	C5'	ADE	91	-20.267	-24.453	8.028	1.00	0.00
ATOM	1054	C4'	ADE	91	-19.674	-25.498	7.078	1.00	0.00
ATOM	1055	04'	ADE	91	-18.409	-25.934	7.525	1.00	0.00
ATOM	1056	C1'	ADE	91	-18.125		6.838	1.00	0.00
ATOM	1057	N9	ADE	91		-27.850	7.511	1.00	0.00
ATOM	1058	C8	ADE	91	-16.894	-28.111	8.849	1.00	0.00
ATOM	1059	N7	ADE	91	-15.783		9.168	1.00	0.00
ATOM	1060	C5	ADE	91	-15.148		7.941	1.00	0.00
ATOM	1061	C6	ADE	91		-29.470	7.566	1.00	0.00
ATOM	1062	N6	ADE	91		-29.988	8.456	1.00	0.00
ATOM	1063	N1	ADE	91		-29.530	6.258	1.00	0.00
ATOM	1064	C2	ADE	91		-29.024	5.368	1.00	0.00
ATOM	1065	N3	ADE	91		-28.427	5.591	1.00	0.00
ATOM	1066	C4	ADE	91		-28.389	6.919	1.00	0.00
ATOM	1067	C3,	ADE	91		-26.785	6.947	1.00	0.00
ATOM	1068	C2'	ADE	91		-27.889	6.975	1.00	0.00
ATOM	1069	03'	ADE	91		-26.716	5.741	1.00	0.00
ATOM	1070	P	ADE	92		-27.929	5.191	1.00	0.00
ATOM	1071		ADE	92		-27.362	4.287	1.00	0.00
ATOM	1072		ADE	92		-28.772	6.336	1.00	0.00
ATOM	1073		ADE	92		-28.766	4.295	1.00	
ATOM	1074		ADE	92		-28.182			
ATOM	1075	C4'	ADE	92		-29.108	2.600	1.00	
ATOM	1076	04'	ADE	92		-29.370	3.584	1.00	0.00
ATOM	1077	C1'		92		-30.713	3.463	1.00	
ATOM	1078	N9	ADE	92		-31.174	4.719	1.00	0.00
ATOM	1079	C8	ADE	92		-31.151	5.987	1.00	0.00
ATOM	1080	N7	ADE	92		-31.602	6.912	1.00	
ATOM	1081	C5	ADE	92		-31.955	6.203	1.00	
ATOM	1082	C6	ADE	92		-32.507	6.597	1.00	
ATOM	1082	N6	ADE	92 92		-32.793	7.871	1.00	
ATOM	1083	NO N1	ADE	92 92		-32.751	5.656	1.00	0.00
ATOM	1085	C2	ADE	92 92		-32.731	4.389	1.00	0.00
ATOM	1085	N3	ADE	92		-31.943	3.889	1.00	
ATOM	1087	C4	ADE	92 92		-31.704	4.863	1.00	
ATOM	1088	C3'	ADE	92 92		-30.478	2.161	1.00	
ATOM	1089	C2'	ADE	92 92		-31.407		1.00	
ATOM	1009	03'		92		-30.742			
AIUM	1090	US	AUC	32	-19.500	-30.142	0.040	1.00	0.00

				(397)			特開2003-135087
	791						792
AT0	M 1091	P CYT	93 -	-19.963 -32			0.00
ATO	M 1092	OP1 CYT	93	-21.022 -32	.751  0.762		0.00
ATO	M 1093	OP2 CYT	93	-20.198 -31	.639 -1.394	4 1.00	0.00
ATO	M 1094	05' CYT	93	-18.635 -32	.949 0.054	4 1.00	0.00
ATO	M 1095	C5' CYT	93	-17.491 -32	.610 -0.708	8 1.00	0.00
ATO	M 1096	C4' CYT	93	-16.365 -33	.597 -0.39	5 1.00	0.00
ATO	M 1097	04' CYT	93	-16.102 -33	.564 0.98	8 1.00	0.00
ATO	M 1098	C1' CYT	93	-15.609 -34			0.00
ATO		N1 CYT		-15.890 -34	.987 2.849	9 1.00	0.00
ATO				-17.106 -34			0.00
ATO		C5 CYT		-17.388 -34			0.00
ATO				-16.349 -35			0.00
· ATO				-16.502 -35			0.00
ATO				-15.174 -35			0.00
ATO				-14.913 -35			0.00
ATO				-13.831 <i>-</i> 35			0.00
AT(				-13.631 -35 -16.742 -35			0.00
ATO				-16.426 -35			0.00
ATO			93	-15.971 -35	.557 -1.77	5 1.00	0.00
ENI							
HE/	ADER 000	000					
REI	MARK	0.00534	1.71627	0.02586	0.01834	1.81270	1.64266
0	.00000						
REI	MARK	2.82104	0.20743	0.85035	1.10380	0.65945	
RF	MARK	0.01211	0.00346	0.01388	0.01801	0.00790	
RE	MARK	123	119	3	1	0	0
	0						
RE	MARK	1378	305	460	273	340	
D.P.	WARY	0.04050	0.05400	0.00000	0.04447	0.05400	0.10700
RE	MARK	0.04052	0.25438	0.03966	0.04447	0.25438	0.13786
RE	MARK	2.38070	0.15632				
RE	MARK	2	2	0	0	0	0
	0						
AT	OM 1	N GLU	1	-0.048 -12	2.352 30.02	1.00	0.00
· AT	OM 2	CA GLU	1	0.835 -12	2.054 28.88	30 1.00	0.00
AT	OM 3	CB GLU	1	2.077 -12	2.953 28.92	25 1.00	0.00
AT		CG GLU	1	3.155 -12			0.00
AT			1	4.162 -13			
AT			1	3.793 -14			
AT			1	5.265 -13			
AT			1	0.068 -12			
	OM 9		1		3.172 27.53		
	OM 10		2	0.368 -11			
	OM 11		2	-0.267 -11			
		CR LYS	2		).299 24.48		0.00
лі	Jm 12	רום מי	L	0.212 I	27.40	1.00	0.00

	702				(330)				村開2003-13
1 TOH	793	CC	LVC	0	1 005	. 0.017	05 047	1 00	794
ATOM	13		LYS	2		-9.217		1.00	0.00
ATOM	14	CD	LYS	2	-1.018	-7.867	24.516	1.00	0.00
ATOM	15	CE	LYS	2	-1.822	-7.904	23.207	1.00	0.00
ATOM	16	NZ	LYS	2		-6.573	22.577	1.00	0.00
ATOM	17	C	LYS	2		-12.757	24.423	1.00	0.00
ATOM	18	0	LYS	2		-12.522	23.304	1.00	0.00
ATOM	19	N	HIS	3		-13.958		1.00	0.00
ATOM	20		HIS	3		-15.179		1.00	0.00
ATOM	21		HIS	3		-15.939		1.00	
ATOM	22		HIS	3		-16.190		1.00	0.00
ATOM	23		HIS	3		-16.132		1.00	0.00
ATOM	24		HIS	3		-16.398	24.854	1.00	0.00
ATOM	25		HIS	3		-16.630	26.041	1.00	0.00
ATOM	26		HIS	3		-16.497	25.795	1.00	0.00
ATOM	27	C	HIS	3		-14.927	23.607	1.00	0.00
ATOM	28	0	HIS	3		-15.106	22.391	1.00	0.00
ATOM	29	N	ARG	4		-14.522	24.230	1.00	0.00
ATOM	30	CA	ARG	4		-14.245		1.00	
ATOM	31	CB	ARG	4		-13.291			0.00
ATOM	32	CG	ARG	4		-11.903	24.517	1.00	0.00
ATOM	33	CD	ARG	4		-10.844		1.00	0.00
ATOM	34	NE	ARG	4		-11.041	22.160	1.00	0.00
ATOM	35	CZ	ARG	4		-10.296	21.147	1.00	0.00
ATOM	36		ARG	4		-9.372	21.365	1.00	
ATOM	37		ARG	4		-10.474	19.914	1.00	0.00
ATOM	38	C	ARG	4		-15.548	23.177	1.00	0.00
ATOM	39	0	ARG	4		-15.862	23.725	1.00	0.00
ATOM	40	N CA	ALA	5		-16.296	22.242	1.00	0.00
ATOM	41	CA	ALA	5		-17.554	21.710	1.00	
ATOM	42	CB	ALA	5		-18.719		1.00	
ATOM	43	C	ALA	5		-17.491	20.213	1.00	0.00
ATOM	44	0 N	ALA	5		-17.493		1.00	0.00
ATOM	45		ARG			-17.410			
ATOM ATOM	46 47	CA CB	ARG ARG	6 6		-17.284 -16.798	17.944 17.376	1.00	0.00 0.00
ATOM	48	CG	ARG	6		-16.418	15.886	1.00	0.00
ATOM	49	CD	ARG	6		-15.423	15.504	1.00	0.00
ATOM	50	NE	ARG	6		-15.984	15.755	1.00	0.00
ATOM	51	CZ	ARG	6		-15.311	15.685	1.00	0.00
ATOM	52		ARG	6		-14.023	15.320	1.00	0.00
ATOM	53		ARG	6		-15.947	15.989	1.00	0.00
ATOM	54	C	ARG	6		-18.555	17.280	1.00	0.00
ATOM	55	0	ARG	6		-19.290	16.623	1.00	0.00
ATOM	56	N	LYS	7		-18.782	17.448	1.00	0.00
ATOM	57	CA	LYS	7		-19.899	16.886	1.00	0.00
ATOM	58	CB	LYS	7		-19.757	17.246	1.00	0.00
ATOM	59	CG	LYS	7		-20.041	18.712	1.00	
ATOM	60	CD	LYS	7		-19.863	18.842	1.00	
ATOM	61	CE	LYS	7		-20.323	20.186	1.00	
ATOM	62	NZ	LYS	7		-20.211	20.188	1.00	

795 796 63 C 7 3.502 -19.890 15.363 1.00 0.00 ATOM LYS 14.744 1.00 0.00 ATOM 0 LYS 7 3.602 -20.943 64 3.449 -18.691 14.773 1.00 ATOM 65 N ARG 8 0.00 ATOM 66 CA ARG 8 3.505 -18.467 13.340 1.00 0.00 3.010 -17.039 13.030 1.00 ATOM 67 CBARG 8 0.00 13.077 1.00 ATOM CG ARG 8 1.476 -16.869 0.00 68 ARG 14.397 ATOM 69 CD 8 0.809 -17.294 1.00 0.00 -0.639 -17.017 14.398 **ATOM** NE ARG 8 1.00 0.00 70 ATOM 71 CZARG 8 -1.567 -17.694 15.103 1.00 0.00 15.985 ATOM 72 NH1 ARG 8 -1.218 -18.639 1.00 0.00 ATOM 73 NH2 ARG 8 -2.862 -17.423 14.921 1.00 0.00 C 4.936 -18.740 12.855 1.00 0.00 ATOM 74 ARG 8 ATOM 75 0 ARG 8 5.729 -17.815 12.679 1.00 0.00 ATOM 76 N GLN 9 5.260 -20.021 12.648 1.00 0.00 ATOM 77  $\mathsf{CA}$ GLN 9 6.568 - 20.48212.207 1.00 0.00 **ATOM** 78 CB GLN 9 6.719 - 21.97812.519 1.00 0.00 ATOM 79 CG GLN 9 6.722 -22.289 14.020 1.00 0.00 ATOM 80 CDGLN 9 6.602 - 23.79114.266 1.00 0.00 ATOM OE1 GLN 9 7.527 - 24.41414.783 1.00 0.00 5.466 -24.383 NE2 GLN 0.00 ATOM 82 9 13.897 1.00 ATOM 83 C GLN 9 6.727 -20.259 10.704 1.00 0.00 ATOM 84 0 GLN 9 6.306 -21.104 9.914 1.00 0.00 ATOM 85 N ALA 10 7.348 -19.141 10.310 1.00 0.00 7.610 - 18.7930.00 ATOM 86 CA ALA 10 8.917 1.00 ATOM 87 CB ALA 10 8.534 -17.574 8.862 1.00 0.00 С 8.235 -19.977 1.00 0.00 ATOM 88 ALA 10 8.172 ATOM 89 0 ALA 10 9.212 - 20.5548.647 1.00 0.00 N TRP 7.674 -20.350 1.00 0.00 ATOM 90 7.016 11 ATOM 91 CATRP 8.181 -21.453 6.215 1.00 0.00 11 1.00 CBTRP 7.198 -21.854 0.00 ATOM 92 11 5.116 ATOM CG TRP 5.973 -22.619 5.538 1.00 0.00 93 11 CD1 TRP ATOM 94 5.056 -22.237 6.456 1.00 0.00 11 NE1 TRP 6.577 1.00 ATOM 95 11 4.070 -23.197 0.00 ATOM CE2 TRP 4.310 -24.263 5.736 1.00 0.00 96 11 ATOM CZ2 TRP 3.629 -25.466 5.488 1.00 0.00 97 11 ATOM 98 CH2 TRP 11 4.152 -26.372 4.554 1.00 0.00 5.342 -26.062 1.00 0.00 ATOM 99 CZ3 TRP 11 3.876 ATOM CE3 TRP 6.010 - 24.8494.123 1.00 0.00 100 11 ATOM CD2 TRP 5.519 -23.921 5.061 1.00 0.00 101 11 **ATOM** 102 C TRP 9.541 -21.081 5.630 1.00 0.00 11 103 0 TRP 9.751 -19.963 5.160 1.00 0.00 ATOM 11 ATOM 104 N LEU 12 10.454 -22.048 5.674 1.00 0.00 CA LEU 11.820 -21.934 1.00 ATOM 105 12 5.180 0.00 ATOM 106 CBLEU 12 12.684 -22.902 6.007 1.00 0.00 ATOM 107 CG LEU 12 14.201 -22.788 5.802 1.00 0.00 CD1 LEU 14.721 -21.392 0.00 ATOM 108 12 6.169 1.00 ATOM 109 CD2 LEU 14.897 -23.837 6.674 1.00 0.00 12 ATOM 110 С LEU 12 11.830 -22.266 3.684 1.00 0.00 0 LEU 12 10.857 -22.839 3.191 1.00 0.00 ATOM 111 ATOM 112 N TRP 13 12.913 -21.924 2.960 1.00 0.00

					(400)				特開とし	003-1
	797								798	
ATOM	113		TRP	13	13.004 -22	.229	1.530	1.00	0.00	
ATOM	114	CB	TRP	13	14.362 -21	.946	0.873	1.00	0.00	
ATOM	115	CG	TRP	13	15.228 -21	.009	1.602	1.00	0.00	
ATOM	116	CD1	TRP	13	15.222 -19	.695	1.391	1.00	0.00	
ATOM	117	NE1	TRP	13	16.136 -19	.082	2.232	1.00	0.00	
ATOM	118	CE2	TRP	13	16.776 -20	.024	3.030	1.00	0.00	
ATOM	119	CZ2	TRP	13	17.763 -19	.955	4.027	1.00	0.00	
ATOM	120	CH2	TRP	13	18.193 -21	.143	4.652	1.00	0.00	
ATOM	121	CZ3	TRP	13	17.636 -22	.380	4.274	1.00	0.00	
ATOM	122	CE3	TRP	13	16.654 -22	.431	3.275	1.00	0.00	
ATOM	123	CD2	TRP	13	16.204 -21	.264	2.635	1.00	0.00	
ATOM	124	С	TRP	13	12.764 -23	3.701	1.368	1.00	0.00	
ATOM	125	0	TRP	13	11.803 -24	.079	0.732	1.00	0.00	
ATOM	126	N	GLU	14	13.645 -24	.509	1.953	1.00	0.00	
ATOM	127		GLU	14	13.566 -25		1.875	1.00	0.00	
ATOM	128	CB	GLU	14	14.566 -26	6.616	2.840	1.00	0.00	
ATOM	129		GLU	14	16.052 -26		2.477	1.00	0.00	
ATOM	130	CD		14	16.341 -26		0.980	1.00	0.00	
ATOM	131	0E1		14	16.314 -27		0.389	1.00	0.00	
ATOM	132	0E2		14	16.578 -25		0.411	1.00	0.00	
ATOM	133	C	GLU	14	12.125 -26		2.017	1.00	0.00	
ATOM	134	0	GLU	14	11.713 -27	.299	1.225	1.00	0.00	
ATOM	135	N	GLU	15	11.336 -25		2.965	1.00	0.00	
ATOM	136		GLU	15	9.946 -26		3.087	1.00	0.00	
ATOM	137	CB	GLU	15	9.304 -25		4.360	1.00	0.00	
ATOM	138	CG	GLU	15	9.981 -26		5.659	1.00	0.00	
ATOM	139	CD	GLU	15	9.105 -25		6.836	1.00	0.00	
ATOM	140		GLU	15	9.370 -24		7.416	1.00		
ATOM	141		GLU	15	8.179 -26		7.153	1.00		
ATOM	142	С	GLU	15	9.128 -25		1.855	1.00		
ATOM	143	0	GLU	15	8.482 -26		1.235	1.00	0.00	
ATOM	144	N	ASP	16	9.149 -24	1.631	1.502	1.00	0.00	
ATOM	145	CA	ASP	16	8.431 -24	1.056	0.361	1.00	0.00	
ATOM	146	CB	ASP	16	8.845 -22	2.588	0.230	1.00		
ATOM	147	CG	ASP	16	8.002 -23	1.878	-0.813	1.00	0.00	
ATOM	148	OD1	ASP	16	6.874 -23	1.481	-0.453	1.00	0.00	
ATOM	149	0D2	ASP	16	8.500 -23	1.736	-1.950	1.00	0.00	
ATOM	150	C	ASP	16	8.779 -24	4.766	-0.946	1.00	0.00	
ATOM	151	0	ASP	16	7.940 -25	5.329	-1.641	1.00	0.00	
ATOM	152	N	LYS	17	10.070 -24	4.703	-1.234	1.00	0.00	
ATOM	153	CA	LYS	17	10.807 -25	5.268	-2.347	1.00	0.00	
ATOM	154	CB	LYS	17	12.303 -25	5.091	-2.000	1.00	0.00	
ATOM	155	CG	LYS	17	13.286 -25	5.751	-2.973	1.00	0.00	
ATOM	156	CD	LYS	17	14.690 -25	5.613	-2.366	1.00	0.00	
ATOM	157	CE	LYS	17	15.707 -20	6.588	-2.968	1.00	0.00	
ATOM	158	NZ	LYS	17	16.931 -20	6.632	-2.147	1.00	0.00	
ATOM	159	C	LYS	17	10.360 -20	6.727	-2.529	1.00	0.00	
ATOM	160	0	LYS	17	9.863 -2	7.104	-3.592	1.00	0.00	
ATOM	161	N	ASN	18	10.522 -2	7.543	-1.480	1.00	0.00	
ATOM	162	CA	ASN	18	10.145 -23	8.950	-1.483	1.00	0.00	

	<b>7</b> 00				(401)				13111112 0 0 3	, 1
	799								800	
ATOM	163	CB	ASN	18	10.654 - 2			1.00	0.00	
ATOM	164	CG	ASN	18	10.510 - 3	31.106	-0.127	1.00	0.00	
ATOM	165	OD1		18	10.232 - 3	31.766	-1.124	1.00	0.00	
ATOM	166	ND2	ASN	18	10.739 -3	31.659	1.064	1.00	0.00	
ATOM	167	C	ASN	18	8.635 -2	29.139	-1.670	1.00	0.00	
ATOM	168	0	ASN	18	8.219 -3	30.013	-2.425	1.00	0.00	
ATOM	169	N	LEU	19	7.806 -7	28.324	-1.003	1.00	0.00	
ATOM	170	CA	LEU	19	6.350 -2	28.385	-1.108	1.00	0.00	
ATOM	171	CB	LEU	19	5.699 -	27.322	-0.206	1.00	0.00	
ATOM	172	CG	LEU	19	4.164 -	27.290	-0.285	1.00	0.00	
ATOM	173		LEU	19	3.561 -	28.575	0.286	1.00	0.00	
ATOM	174		LEU	19	3.626 -			1.00	0.00	
ATOM	175	C	LEU	19	5.934 -		-2.568	1.00	0.00	
ATOM	176	0	LEU	19	5.167 -		-3.082	1.00	0.00	
ATOM	177	N	ARG	20	6.454 -		-3.236	1.00	0.00	
ATOM	178	CA	ARG	20	6.191 -		-4.638	1.00	0.00	
ATOM	179	CB	ARG	20	7.000 -		-5.032	1.00	0.00	
ATOM	180	CG	ARG	20	6.806 -		-6.492	1.00	0.00	
ATOM	181	CD	ARG	20	7.710 -		-6.850	1.00	0.00	
ATOM	182	NE	ARG	20	7.710 -			1.00	0.00	
		CZ	ARG							
ATOM	183			20	7.792 -			1.00	0.00	
ATOM	184		ARG	20	7.314 -			1.00	0.00	
ATOM	185		ARG	20	8.713 -		-4.255	1.00	0.00	
ATOM	186	C	ARG	20	6.541 -		-5.482	1.00	0.00	
ATOM	187	0	ARG	20	5.721 -		-6.283	1.00	0.00	
ATOM	188	N	SER	21	7.749 -		-5.285	1.00	0.00	
ATOM	189	CA	SER	21	8.174 -		-5.997	1.00	0.00	
ATOM	190	CB	SER	21	9.581 -		-5.552	1.00	0.00	
ATOM	191	OG	SER	21	10.481 -		-5.706	1.00	0.00	
ATOM	192	C	SER	21	7.163 -		-5.767	1.00	0.00	
ATOM	193	0	SER	21	6.795 -		-6.705	1.00	0.00	
ATOM	194	N	GLY	22	6.705 -			1.00	0.00	
ATOM	195	CA	GLY	22	5.725 -		-4.120	1.00	0.00	
ATOM	196	C	GLY	22	4.424 -		-4.903	1.00	0.00	
ATOM	197	0	GLY	22	3.934 -			1.00	0.00	
ATOM	198	N	VAL	23	3.866 -		-4.936	1.00	0.00	
ATOM	199	CA	VAL	23	2.635 -		-5.663	1.00	0.00	
ATOM	200	CB	VAL	23	2.216 -	29.016	-5.501	1.00	0.00	
ATOM	201		VAL	23	1.001 -		-6.386	1.00	0.00	
ATOM	202	CG2	VAL	23	1.827 -	28.737	-4.047	1.00	0.00	
ATOM	203	C	VAL	23	2.793 -	30.873	-7.132	1.00	0.00	
ATOM	204	0	VAL	23	1.910 -	31.511	-7.696	1.00	0.00	
ATOM	205	N	ARG	24	3.910 -	30.501	-7.762	1.00	0.00	
ATOM	206	CA	ARG	24	4.126 -	30.840	-9.161	1.00	0.00	
ATOM	207	CB	ARG	24	5.347 -	30.075	-9.699	1.00	0.00	
ATOM	208	CG	ARG	24	5.317 -	29.930	-11.230	1.00	0.00	
ATOM	209	CD	ARG	24	4.397 -	28.784	-11.680	1.00	0.00	
ATOM	210	NE	ARG	24	4.345 -	28.687	-13.149	1.00	0.00	
ATOM	211	CZ	ARG	24	3.960 -	27.612	-13.855	1.00	0.00	
ATOM	212	NH1	ARG	24	3.999 -	27.662	-15.189	1.00	0.00	

	801							802
ATOM	213	NH2	ARG	24	3.538 -26.489 -13	3.261	1.00	0.00
ATOM	214	C	ARG	24	4.271 -32.359 -9	9.349	1.00	0.00
ATOM	215	0	ARG	24	3.795 -32.906 -10	0.340	1.00	0.00
ATOM	216	N	LYS	25	4.939 -33.037 -8	8.407	1.00	0.00
ATOM	217	CA	LYS	25	5.207 -34.472 -8	8.450	1.00	0.00
ATOM	218	CB	LYS	25	6.492 -34.750 -	7.656	1.00	0.00
ATOM	219	CG	LYS	25	7.083 -36.141 -	7.934	1.00	0.00
ATOM	220	CD	LYS	25	8.619 -36.129 -	7.864	1.00	0.00
ATOM	221	CE	LYS	25	9.182 -35.722 -	6.496	1.00	0.00
ATOM	222	NZ	LYS	25		5.510	1.00	0.00
ATOM	223	С	LYS	25	4.040 -35.370 -	8.023	1.00	0.00
ATOM	224	0	LYS	25		8.374	1.00	0.00
ATOM	225	N	TYR	26		7.270	1.00	0.00
ATOM	226	CA	TYR	26		6.777	1.00	0.00
ATOM	227	CB	TYR	26		5.301	1.00	0.00
ATOM	228	CG	TYR	26		5.107	1.00	0.00
ATOM	229	CD1	TYR	26		5.552	1.00	0.00
ATOM	230	CE1	TYR	26		5.402	1.00	0.00
ATOM	231	CZ	TYR	26	5.952 -38.042 -	4.804	1.00	0.00
ATOM	232	OH	TYR	26		4.662	1.00	0.00
ATOM	233	CE2	TYR	26		4.360	1.00	0.00
ATOM	234	CD2	TYR	26	4.587 -36.053 -	4.509	1.00	0.00
ATOM	235	С	TYR	26	0.550 -35.037 -	6.988	1.00	0.00
ATOM	236	0	TYR	26		6.665	1.00	0.00
ATOM	237	N	GLY	27	0.475 -33.818 -	7.531	1.00	0.00
ATOM	238	CA	GLY	27		7.802	1.00	0.00
ATOM	239	С	GLY	27	-1.275 -32.333 -	6.592	1.00	0.00
ATOM	240	0	GLY	27	-0.959 -32.657 -	5.448	1.00	0.00
ATOM	241	N	GLU	28	-2.078 -31.295 -	6.857	1.00	0.00
ATOM	242	CA	GLU	28	-2.683 -30.467 -	5.825	1.00	0.00
ATOM	243	CB	GLU	28	-3.081 -29.101 -	6.414	1.00	0.00
ATOM	244	CG	GLU	28	-3.315 -28.063 -	5.309	1.00	0.00
ATOM	245	CD	GLU	28	-3.626 -26.666 -	5.840	1.00	0.00
ATOM	246	0E1	GLU	28	-2.890 -26.199 -	6.740	1.00	0.00
ATOM	247	0E2	GLU	28	-4.553 -26.025 -	5.303	1.00	0.00
ATOM	248	C	GLU	28		5.284	1.00	0.00
ATOM	249	0	GLU	28		6.057	1.00	0.00
ATOM	250	N	GLY	29		3.966	1.00	0.00
ATOM	251	CA	GLY	29		3.342	1.00	0.00
ATOM	252	C	GLY	29		3.047	1.00	0.00
ATOM	253	0	GLY	29		3.081	1.00	0.00
ATOM	254	N	ASN	30		2.743	1.00	0.00
ATOM	255	CA	ASN	30		-2.400	1.00	0.00
ATOM	256	CB	ASN	30		3.644	1.00	0.00
ATOM	257	CG	ASN	30		4.780	1.00	0.00
ATOM	258		ASN	30		-5.756	1.00	0.00
ATOM	259		ASN	30		4.659	1.00	0.00
ATOM	260	C	ASN	30		-1.311	1.00	0.00
ATOM	261	0	ASN	30		-1.369	1.00	0.00
ATOM	262	N	TRP	31	-2.266 -33.794 -	-0.323	1.00	0.00

	000				(400)				1017612
, mou	803	٥,	mp.p.			00 010			804
ATOM	263	CA	TRP	31		-33.310	0.778	1.00	0.00
ATOM	264	CB	TRP	31		-32.190	1.492	1.00	0.00
ATOM	265	CG	TRP	31	-2.710	-31.175	0.530	1.00	0.00
ATOM	266	CD1	TRP	31	-3.997	-30.966	0.185	1.00	0.00
ATOM	267	NE1	TRP	31	-4.069	-29.949	-0.742	1.00	0.00
ATOM	268	CE2	TRP	31	-2.813	-29.460	-1.042	1.00	0.00
ATOM	269	CZ2	TRP	31	-2.350	-28.457	-1.901	1.00	0.00
ATOM	270	CH2	TRP	31	-0.969	-28.216	-1.978	1.00	0.00
ATOM	271	CZ3	TRP	31	-0.072	-28.963	-1.203	1.00	0.00
ATOM	272	CE3	TRP	31	-0.547	-29.962	-0.342	1.00	0.00
ATOM	273	CD2	TRP	31	-1.926	-30.233	-0.241	1.00	0.00
ATOM	274	С	TRP	31		-34.427	1.711	1.00	0.00
ATOM	275	0	TRP	31		-34.440	2.146	1.00	0.00
ATOM	276	N	SER	32		-35.368	2.008	1.00	0.00
ATOM	277	CA	SER	32		-36.497	2.864	1.00	0.00
ATOM	278	CB	SER	32		-37.413	3.012	1.00	0.00
ATOM	279	OG	SER	32		-37.869	1.750	1.00	0.00
ATOM	280	C	SER	32		-37.224	2.274	1.00	0.00
ATOM	281	0	SER	32		-37.502	2.974	1.00	0.00
ATOM	282	N	LYS	33		-37.500	0.966	1.00	0.00
ATOM	283	CA	LYS	33		-38.157	0.201	1.00	0.00
ATOM	284	CB	LYS	33		-38.390	-1.225	1.00	0.00
ATOM	285	CG	LYS	33		-39.161	-2.116	1.00	0.00
ATOM	286	CD	LYS	33		-39.309	-3.552	1.00	0.00
ATOM	287	CE	LYS	33		-40.231			
ATOM	288	NZ	LYS	33		-40.231 -40.348	-3.667	1.00	0.00
ATOM	289	C	LYS				-5.066	1.00	0.00
				33		-37.333	0.240	1.00	0.00
MOTA	290	0 N	LYS	33		-37.853	0.623	1.00	0.00
ATOM Atom	291 292	N CA	ILE ILE	34		-36.052	-0.149	1.00	0.00
		CA CB		34		-35.144	-0.161	1.00	0.00
ATOM	293 294		I L E	34 34		-33.741	-0.631	1.00	0.00
ATOM Atom	294		ILE	34 34		-32.696 -33.778	-0.391	1.00	0.00
							-2.133	1.00	0.00
ATOM	296	CD1		34		-32.583	-2.588	1.00	0.00
ATOM	297	C	ILE	34		-35.120	1.209	1.00	0.00
ATOM	298	0	ILE	34		-35.236	1.282	1.00	0.00
ATOM	299	N	LEU	35 25		-34.982	2.285	1.00	0.00
ATOM	300	CA	LEU	35		-34.957	3.663	1.00	0.00
ATOM	301	CB	LEU	35		-34.656	4.591	1.00	0.00
ATOM	302	CG	LEU	35		-34.026	5.954	1.00	0.00
ATOM	303		LEU	35		-33.784	6.698	1.00	0.00
ATOM	304		LEU	35		-34.883	6.831	1.00	0.00
ATOM	305	C	LEU	35		-36.293	3.991	1.00	0.00
ATOM	306	0	LEU	35		-36.324	4.624	1.00	0.00
ATOM	307	N	LEU	36		-37.412	3.552	1.00	0.00
ATOM	308	CA	LEU	36		-38.730	3.798	1.00	0.00
ATOM	309	CB	LEU	36		-39.847	3.235	1.00	0.00
ATOM	310	CG	LEU	36		-40.762	4.303	1.00	0.00
ATOM	311		LEU			-41.548	5.081	1.00	0.00
ATOM	312	CD2	LEU	36	1.554	-39.999	5.259	1.00	0.00

	005				(101)				2000
A TOM	805	^	t PH	00	F 410	20 000	0 000	1 00	806
ATOM	313	C	LEU	36		-38.803	3.226	1.00	0.00
ATOM	314	0	LEU	36		-39.234	3.920	1.00	0.00
ATOM	315	N	HIS	37		-38.372	1.974	1.00	0.00
ATOM	316	CA	HIS	37		-38.376	1.337	1.00	0.00
ATOM	317	CB	HIS	37		-37.991	-0.145	1.00	0.00
ATOM	318	CG	HIS	37	5.935	-38.924	-0.970	1.00	0.00
ATOM	319	ND1	HIS	37	6.268	-40.253	-1.181	1.00	0.00
ATOM	320	CE1	HIS	37	5.308	-40.786	-1.956	1.00	0.00
ATOM	321	NE2	HIS	37	4.356	-39.908	-2.279	1.00	0.00
ATOM	322	CD2	HIS	37	4.758	-38.733	-1.652	1.00	0.00
ATOM	323	C	HIS	37	7.856	-37.398	2.033	1.00	0.00
ATOM	324	0	HIS	37	8.920	-37.793	2.515	1.00	0.00
ATOM	325	N	TYR	38	7.468	-36.120	2.051	1.00	0.00
ATOM	326	CA	TYR	38	8.236	-35.007	2.581	1.00	0.00
ATOM	327	СВ	TYR	38	8.163	-33.865	1.565	1.00	0.00
ATOM	328	CG	TYR	38	8.736	-34.225	0.202	1.00	0.00
ATOM	329		TYR	38		-34.064	-0.964	1.00	0.00
ATOM	330		TYR	38	8.502	-34.398	-2.220	1.00	0.00
ATOM	331	CZ	TYR	38		-34.890	-2.313	1.00	0.00
ATOM	332	ОН	TYR	38		-35.215	-3.529	1.00	0.00
ATOM	333		TYR	38		-35.054	-1.153	1.00	0.00
ATOM	334		TYR	38		-34.722	0.100	1.00	0.00
ATOM	335	C	TYR	38		-34.562	3.957	1.00	0.00
ATOM	336	0	TYR	38		-34.067	4.111	1.00	0.00
ATOM	337	N	LYS	39		-34.743	4.957	1.00	0.00
ATOM	338	CA	LYS	39		-34.408	6.348	1.00	0.00
ATOM	339	CB	LYS	39		-35.444	7.211	1.00	0.00
ATOM	340	CG	LYS	39		-36.870	6.937	1.00	0.00
ATOM	341	CD	LYS	39		-37.843	6.787	1.00	0.00
ATOM	342	CE	LYS	39		-39.247	6.343	1.00	0.00
ATOM	343	NZ	LYS	39		-39.274	4.959	1.00	0.00
ATOM	344	C	LYS	39		-32.979	6.613	1.00	0.00
ATOM	345	0	LYS	39		-32.753	6.840	1.00	0.00
ATOM	346	N	PHE	40		-32.019	6.573	1.00	0.00
ATOM	347	CA	PHE	40		-30.596	6.783	1.00	0.00
ATOM	348	CB	PHE	40		-29.811	6.152	1.00	0.00
ATOM	349	CG	PHE	40		-30.122	4.682	1.00	0.00
ATOM	350		PHE	40		-31.092	4.280	1.00	0.00
ATOM	351		PHE	40		-31.379	2.916	1.00	0.00
ATOM	352	CZ	PHE	40		-30.696	1.949	1.00	0.00
	353		PHE 2	40		-29.727	2.348	1.00	0.00
ATOM			PHE	40				1.00	0.00
ATOM	354					-29.440	3.712		
ATOM	355	C	PHE	40 40		-30.270	8.274	1.00	$0.00 \\ 0.00$
ATOM	356	0 N	PHE	40		-31.166	9.116	1.00	
ATOM	357	N	ASN			-28.995	8.617	1.00	0.00
ATOM	358	CA	ASN			-28.572	10.003	1.00	0.00
ATOM	359	CB	ASN			-27.223	10.075	1.00	
ATOM	360	CG	ASN			-27.280	9.509	1.00	
ATOM	361		I ASN			-28.236	9.752	1.00	
ATOM	362	ND2	2 ASN	41	11.383	-26.251	8.768	1.00	0.00

807 808 **ATOM** 363 C ASN 41 7.485 -28.508 10.760 1.00 0.00 0 ASN 41 6.973 -27.424 11.035 1.00 0.00 ATOM 364 ATOM 365 N ASN 42 6.939 -29.681 11.102 1.00 0.00 ATOM 366 CA ASN 42 5.689 -29.839 11.838 1.00 0.00 ATOM 367 CBASN 42 5.889 -29.406 13.302 1.00 0.00 ATOM 368 CGASN 42 4.774 -29.901 14.222 1.00 0.00 OD1 ASN 4.966 -30.855 ATOM 369 42 14.973 1.00 0.00 ND2 ASN 3.609 -29.258 1.00 ATOM 370 42 14.187 0.00 **ATOM** 371 C ASN 42 4.556 -29.095 11.125 1.00 0.00 0 ASN 3.955 -28.175 ATOM 372 42 11.680 1.00 0.00 ATOM 373 N ARG 43 4.277 -29.500 9.882 1.00 0.00  $\mathsf{CA}$ 3.244 -28.906 9.048 0.00 ATOM 374 ARG 43 1.00 **ATOM** 375 CBARG 43 3.844 -28.413 7.728 1.00 0.00 1.00 CG ARG 5.103 -27.560 ATOM 376 43 7.873 0.00 ATOM 377 CD ARG 43 4.865 -26.262 8.642 1.00 0.00 8.499 ATOM NE ARG 6.042 -25.404 1.00 0.00 378 43 ATOM 379 CZARG 43 6.162 -24.168 8.996 1.00 0.00 ATOM NH1 ARG 7.328 -23.524 8.877 1.00 0.00 380 43 ATOM 381 NH2 ARG 5.135 -23.556 9.599 1.00 0.00 43 ATOM 382 C ARG 43 2.170 -29.949 8.758 1.00 0.00 ATOM 383 0 ARG 43 2.447 - 30.9538.103 1.00 0.00 **ATOM** 384 N THR 44 0.944 - 29.7089.226 1.00 0.00 ATOM 385 CATHR 44 -0.182 -30.5978.983 1.00 0.00 386 CB THR -1.334 -30.2589.941 1.00 0.00 ATOM 44 ATOM 387 CG2 THR 44 -0.892 -30.28111.408 1.00 0.00 ATOM OG1 THR -1.856 -28.983 388 9.615 1.00 0.00 44 C ATOM 389 THR 44 -0.646 -30.4047.539 1.00 0.00 0 THR ATOM 390 44 -0.251 - 29.4376.883 1.00 0.00 ATOM N SER -1.512 -31.293 7.038 391 45 1.00 0.00 ATOM CA SER 45 -2.033 -31.149 5.686 0.00 392 1.00 **ATOM** CBSER -2.910 -32.346 5.300 1.00 393 45 0.00 SER **ATOM** 394 OG 45 -4.266 -32.177 5.659 1.00 0.00 ATOM 395 C SER 45 -2.740 -29.791 5.535 1.00 0.00 ATOM 396 0 SER -2.760 -29.219 4.444 1.00 0.00 45 ATOM 397 N VAL 46 -3.296 -29.272 6.641 1.00 0.00 ATOM 398 CA VAL 46 -3.946 -27.976 6.702 1.00 0.00 CBVAL -4.700 -27.803 1.00 0.00 ATOM 399 46 8.034 ATOM CG1 VAL -5.248 -26.381 8.197 1.00 0.00 400 46 CG2 VAL -5.869 -28.795 ATOM 401 46 8.109 1.00 0.00 С VAL ATOM 402 46 -2.874 -26.913 6.454 1.00 0.00 0 VAL -3.039 -26.108 0.00 ATOM 403 46 5.542 1.00 N MET -1.772 -26.924 ATOM 404 47 7.224 1.00 0.00 ATOM 405 CA MET 47 -0.691 -25.961 7.017 1.00 0.00 ATOM 406 CBMET 47 0.494 - 26.1877.966 1.00 0.00 CG MET 0.164 -26.211 ATOM 407 47 9.460 1.00 0.00 SD -0.946 -24.943 0.00 ATOM 408 MET 47 10.117 1.00 ATOM 409 CE MET 47 -0.864 -25.443 11.855 1.00 0.00 ATOM C MET 47 -0.198 -25.988 0.00 410 5.564 1.00 ATOM 411 0 MET 47 0.036 - 24.9314.981 1.00 0.00 ATOM 412 N LEU 48 -0.048 -27.1824.971 1.00 0.00

	809				(100)				010	10
ATOM	413	CA	LEU	48	U 36U	-27.321	3.583	1 00	810	
ATOM	413		LEU	48		-28.798			0.00	
ATOM	415		LEU	48			3.163	1.00	0.00	
			LEU			-29.446	3.473	1.00	0.00	
MOTA	416			48		-29.715	4.961	1.00	0.00	
ATOM	417		LEU	48		-30.777	2.735	1.00	0.00	
ATOM	418		LEU	48		-26.577	2.658	1.00	0.00	
ATOM	419		LEU	48		-25.777	1.827	1.00	0.00	
ATOM	420		LYS	49		-26.837	2.810	1.00	0.00	
ATOM	421		LYS	49		-26.184		1.00	0.00	
ATOM	422		LYS	49		-26.724		1.00	0.00	
ATOM	423		LYS	49		-28.061		1.00	0.00	
ATOM	424		LYS	49		-28.684	1.956	1.00	0.00	
ATOM	425	CE	LYS	49		-29.305		1.00	0.00	
ATOM	426	NZ	LYS			-30.460		1.00	0.00	
ATOM	427	C	LYS	49		-24.669	2.188	1.00	0.00	
ATOM	428	0	LYS	49		-23.943	1.202	1.00	0.00	
ATOM	429	N	ASP	50		-24.186	3.428	1.00	0.00	
ATOM	430	CA	ASP	50		-22.760		1.00	0.00	
ATOM	431	CB	ASP	50		-22.532		1.00	0.00	
ATOM	432		ASP	50		-23.028		1.00	0.00	
ATOM	433		ASP	50		-23.678		1.00	0.00	
ATOM	434		ASP	50		-22.719		1.00	0.00	
ATOM	435	C	ASP	50		-22.130	2.987	1.00	0.00	
ATOM	436	0	ASP	50		-21.162		1.00	0.00	
ATOM	437	N	ARG	51	-0.313	-22.691		1.00	0.00	
ATOM	438	CA	ARG	51	0.912	-22.219	2.563	1.00	0.00	
ATOM	439	CB	ARG	51		-23.155	2.928	1.00	0.00	
ATOM	440	CG	ARG	51		-22.800	2.231	1.00	0.00	
ATOM	441	CD	ARG	51		-21.425		1.00	0.00	
ATOM	442	NE	ARG	51		-21.069		1.00	0.00	
ATOM	443	CZ	ARG	51		-19.856		1.00	0.00	
ATOM	444		ARG	51		-18.903		1.00		
ATOM	445		ARG	51		-19.591	1.461	1.00	0.00	
ATOM		C	ARG	51		-22.113	1.048	1.00	0.00	
ATOM	447	0	ARG	51		-21.045	0.477	1.00	0.00	
ATOM	448	N	TRP	52		-23.218	0.400	1.00	0.00	
ATOM	449	CA	TRP	52		-23.259	-1.041	1.00	0.00	
ATOM	450	CB	TRP	52		-24.687	-1.490	1.00	0.00	
ATOM	451	CG	TRP	52		-24.890	-2.973	1.00	0.00	
ATOM	452		TRP	52		-25.323	-3.687	1.00	0.00	
ATOM	453		TRP	52		-25.418	-5.017	1.00	0.00	
ATOM	454		TRP	52 52		-25.031	-5.234	1.00	0.00	
ATOM	455		TRP	52		-24.950	-6.393	1.00	0.00	
ATOM	456		TRP	52		-24.511	-6.289	1.00	0.00	
ATOM	457		TRP	52		-24.163	-5.032	1.00	0.00	
ATOM	458		TRP	52 52		-24.248	-3.872	1.00	0.00	
ATOM	459		TRP	52		-24.686	-3.941	1.00	0.00	
ATOM	460	C	TRP	52		-22.284	-1.549	1.00	0.00	
ATOM	461	0	TRP	52		-21.585		1.00	0.00	
ATOM	462	N	ARG	53	-2.046	-22.227	-0.903	1.00	0.00	

	811							812
ATOM	463	CA	ARG	53	-3.124 -21.327	-1.297	1.00	0.00
ATOM	464	CB	ARG	53	-4.367 -21.537	-0.421	1.00	0.00
ATOM	465	CG	ARG	53	-5.096 -22.837	-0.797	1.00	0.00
ATOM	466	CD	ARG	53	-6.389 -23.028	0.004	1.00	0.00
ATOM	467	NE	ARG	53	-6.162 -23.092	1.458	1.00	0.00
ATOM	468	CZ	ARG	53	-7.156 -23.226	2.354	1.00	0.00
ATOM	469	NH1		53	-8.420 -23.363	1.939	1.00	0.00
ATOM	470	NH2		53	-6.913 -23.231	3.669	1.00	0.00
ATOM	471	C	ARG	53	-2.637 -19.879	-1.241	1.00	0.00
ATOM	472	0	ARG	53	-2.797 -19.139	-2.212	1.00	0.00
ATOM	473	N	THR	54	-2.024 -19.481	-0.118	1.00	0.00
ATOM	474	CA	THR	54	-1.481 -18.140	0.046	1.00	0.00
ATOM	475	CB	THR		-0.835 -17.996	1.431	1.00	0.00
ATOM	476		THR	54	-0.275 -16.586	1.649	1.00	0.00
ATOM	477		THR	54	-1.813 -18.248	2.419	1.00	0.00
ATOM	478	C	THR	54	-0.488 -17.866	-1.085	1.00	0.00
ATOM	479	0	THR	54	-0.556 -16.818	-1.720	1.00	0.00
ATOM	480	N	MET	55	0.420 -18.810	-1.353	1.00	0.00
ATOM	481	CA	MET	55	1.399 -18.672	-2.420	1.00	0.00
ATOM	482	CB	MET	55	2.338 -19.889	-2.438	1.00	0.00
ATOM	483	CG	MET	55	3.731 -19.547	-1.906	1.00	0.00
ATOM	484	SD	MET	55	4.605 -18.283	-2.874	1.00	0.00
ATOM	485	CE	MET	55	6.262 -18.500	-2.205	1.00	0.00
ATOM	486	C	MET	55	0.731 -18.489	-3.786	1.00	0.00
ATOM	487	0	MET	55	1.163 -17.655	-4.575	1.00	0.00
ATOM	488	N	LYS	56	-0.315 -19.259	-4.091	1.00	0.00
ATOM	489	CA	LYS	56	-1.004 -19.161	-5.368	1.00	0.00
ATOM,	490	CB	LYS	56	-2.054 -20.276	-5.499	1.00	0.00
ATOM	491	CG	LYS	56	-1.390 -21.618	-5.822	1.00	0.00
ATOM	492	CD	LYS	56	-2.367 -22.800	-5.864	1.00	0.00
ATOM	493	CE	LYS	56	-3.639 -22.591	-6.691	1.00	0.00
ATOM	494	NZ	LYS	56	-4.347 -23.872	-6.893	1.00	0.00
ATOM	495	С	LYS	56	-1.645 -17.789	-5.588	1.00	0.00
ATOM	496	0	LYS	56	-1.733 -17.350	-6.735	1.00	0.00
ATOM	497	N	LYS	57	-2.102 -17.118	-4.520	1.00	0.00
ATOM	498	CA	LYS	57	-2.770 -15.825	-4.631	1.00	0.00
ATOM	499	CB	LYS	57	-3.212 -15.281	-3.259	1.00	0.00
ATOM	500	CG	LYS	57	-2.257 -14.270	-2.602	1.00	0.00
ATOM	501	CD	LYS	57	-2.779 -13.911	-1.206	1.00	0.00
ATOM	502	CE	LYS	57	-1.751 -13.087	-0.422	1.00	0.00
- ATOM	503	NZ	LYS	57	-2.292 -12.640	0.876	1.00	0.00
ATOM	504	С	LYS	57	-2.005 -14.802	-5.477	1.00	0.00
ATOM	505	0	LYS	57	-2.626 -14.130	-6.298	1.00	0.00
ATOM	506	N	LEU	58	-0.680 -14.678	-5.298	1.00	0.00
ATOM	507	CA	LEU	58	0.130 -13.723	-6.057	1.00	0.00
ATOM	508	CB	LEU	58	1.073 -12.920	-5.137	1.00	0.00
ATOM	509	CG	LEU	58	2.455 -13.505	-4.790	1.00	0.00
ATOM	510		LEU	58	3.070 -12.693	-3.644	1.00	0.00
ATOM	511		LEU	58	2.400 -14.978	-4.393	1.00	0.00
ATOM	512	C	LEU	58	0.742 -14.324	-7.322	1.00	0.00
Om	016	J		00	0., iL 14.0L4	,	1.00	0.00

```
813
                                                                 814
       513 0
ATOM
                LEU
                        58
                                 1.855 -13.978 -7.713 1.00 0.00
                 LYS
ATOM
       514 N
                        59
                                -0.016 -15.216 -7.968
                                                       1.00 0.00
       515 CA
                LYS
                        59
ATOM
                                 0.351 -15.903 -9.192 1.00
                                                              0.00
       516 CB
ATOM
                LYS
                        59
                                 0.172 -14.992 -10.417
                                                       1.00
                                                              0.00
ATOM
       517 CG
                 LYS
                        59
                                 0.175 -15.823 -11.711
                                                        1.00
                                                              0.00
                                 0.079 -14.920 -12.943 1.00
ATOM
       518 CD
                 LYS
                        59
                                                              0.00
        519 CE
                LYS
                                 0.149 -15.776 -14.214 1.00
ATOM
                        59
                                                              0.00
ATOM
        520 NZ
                 LYS
                        59
                                 0.090 -14.949 -15.432
                                                       1.00
                                                              0.00
        521 C
                 LYS
                                                        1.00
ATOM
                        59
                                 1.748 -16.511 -9.086
                                                              0.00
ATOM
        522 0
                 LYS
                        59
                                 2.644 -16.189 -9.866
                                                        1.00
                                                              0.00
        523 N
                 LEU
ATOM
                        60
                                 1.913 -17.425 -8.128
                                                        1.00
                                                              0.00
        524 CA
                 LEU
ATOM
                        60
                                 3.174 -18.150 -7.989
                                                        1.00
                                                              0.00
ATOM
        525
            CB
                 LEU
                        60
                                 3.244 -18.932 -6.666
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        526
            CG
                 LEU
                                                -6.692 1.00
                        60
                                 4.360 - 19.998
                                                              0.00
ATOM
        527 CD1 LEU
                        60
                                 5.752 -19.354 -6.697
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        528
             CD2 LEU
                        60
                                 4.208 -20.960
                                                -5.514
                                                        1.00
                                                               0.00
            C
ATOM
        529
                 LEU
                        60
                                 3.125 -19.098 -9.182
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        530 0
                 LEU
                                 3.974 -19.102 -10.070 1.00
                                                               0.00
                        60
        531 N
                 ILE
                                 2.047 -19.879 -9.147 1.00
ATOM
                        61
                                                               0.00
ATOM
        532 CA ILE
                                 1.621 -20.856 -10.111
                        61
                                                        1.00
                                                              0.00
ATOM
        533
             CB. ILE
                                 0.257 -21.404 -9.640
                                                        1.00
                                                              0.00
                        61
ATOM
        534
             CG2 ILE
                                -0.755 -20.320 -9.213
                                                        1.00
                                                               0.00
                        61
ATOM
        535
             CG1 ILE
                                -0.356 -22.246 -10.750
                                                        1.00
                                                              0.00
                        61
ATOM
        536
             CD1 ILE
                        61
                                -1.363 -23.273 -10.223
                                                        1.00
                                                              0.00
ATOM
        537
             C
                 ILE
                                 1.602 -20.224 -11.509
                                                        1.00
                                                               0.00
                        61
ATOM
        538
             0
                 ILE
                                 0.831 -19.306 -11.784
                                                        1.00
                                                               0.00
                        61
             N·
                 SER
ATOM
        539
                        62
                                 2.472 -20.737 -12.383
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        540
             CA
                 SER
                        62
                                 2.643 -20.331 -13.766
                                                        1.00
                                                              0.00
             CB
                 SER
                                 3.705 -19.227 -13.878
ATOM
        541
                        62
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
             0G
                 SER
                                 3.261 -18.021 -13.288
        542
                        62
                                                        1.00
                                                               0.00
             C
                 SER
ATOM
        543
                        62
                                 3.076 -21.585 -14.525
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        544
             0
                 SER
                        62
                                 3.778 -22.425 -13.961
                                                        1.00 0.00
ATOM
        545
             N
                 SER
                        63
                                  2.653 -21.726 -15.786
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        546
             CA
                 SER
                        63
                                 2.988 -22.893 -16.594
                                                         1.00
                                                               0.00
             CB
                 SER
ATOM
        547
                        63
                                 2.539 -22.673 -18.045
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        548
             0G
                 SER
                        63
                                 2.975 -23.749 -18.848
                                                        1.00
                                                               0.00
        549
             C
                 SER
                        63
                                                               0.00
ATOM
                                 2.339 -24.138 -15.981
                                                        1.00
             0
                 SER
ATOM
        550
                        63
                                 3.023 -25.117 -15.675
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        551
             N
                 ASP
                                 1.018 -24.079 -15.790
                                                         1.00
                                                               0.00
                        64
ATOM
             CA
                 ASP
        552
                        64
                                  0.199 -25.139 -15.217
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        553
             CB
                 ASP
                                 -0.799 -24.503 -14.238
                                                        1.00
                                                               0.00
                        64
ATOM
        554
             CG ASP
                                 -1.645 -25.530 -13.491
                                                         1.00
                                                               0.00
                         64
             OD1 ASP
ATOM
        555
                        64
                                 -2.804 -25.187 -13.175
                                                        1.00
                                                               0.00
             OD2 ASP
ATOM
        556
                         64
                                 -1.118 -26.640 -13.256
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
             C
                 ASP
        557
                         64
                                 -0.503 -25.918 -16.334
                                                        1.00
                                                               0.00
                                 -0.524 -25.477 -17.482
             0
                 ASP
                                                               0.00
ATOM
        558
                         64
                                                         1.00
ATOM
             N
                 SER
                                 -1.071 -27.078 -15.987
        559
                         65
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        560
             CA
                 SER
                                 -1.784 -27.975 -16.884
                                                         1.00
                                                               0.00
                         65
ATOM
        561
             CB
                 SER
                         65
                                 -3.063 -27.318 -17.430 1.00
                                                               0.00
             OG . SER
ATOM
        562
                         65
                                 -3.944 -28.299 -17.949 1.00 0.00
```

	015				(100)				010
<b>АТОИ</b>	815	С	CED	65	_0 962	_20_401	_17 002	1 00	816 0.00
ATOM	563		SER SER			-28.481 -28.022		1.00	
ATOM	564	0		65 66				1.00	0.00
ATOM	565	N	GLU	66 CC		-29.442		1.00	0.00
ATOM	566	CA	GLU	66		-30.052		1.00	0.00
ATOM	567	CB	GLU	66		-30.967		1.00	0.00
ATOM	568	CG	GLU	66		-30.138		1.00	0.00
ATOM	569	CD	GLU	66		-30.937		1.00	0.00
ATOM	570	0E1		66		-30.303		1.00	0.00
ATOM	571	0E2		66		-32.143		1.00	0.00
ATOM	572	C	GLU	66		-30.787		1.00	0.00
ATOM	573	0	GLU	66		-30.728		1.00	0.00
ATOM	574	N	ASP	67		-31.445		1.00	0.00
ATOM	575	CA	ASP	67		-32.151		1.00	0.00
ATOM	576	CB	ASP	67		-33.229		1.00	0.00
ATOM	577	CG	ASP	67	-1.692	-34.277	-18.696	1.00	0.00
ATOM	578	OD1	ASP	67	-1.172	-34.042	-17.583	1.00	0.00
ATOM	579	0D2	ASP	67	-1.500	-35.297	-19.392	1.00	0.00
ATOM	580	C	ASP	67	-2.942	-31.130	-20.609	1.00	0.00
ATOM	581	0T1	ASP	67	-3.528	-31.426	-21.673	1.00	0.00
ATOM	582	0T2	ASP	67	-3.263	-30.185	-19.849	1.00	0.00
ATOM	583	05'	GUA	68	-7.665	-41.140	10.506	1.00	0.00
ATOM	584	C5'	GUA	68	-7.399	-41.815	9.294	1.00	0.00
ATOM	585	C4'	GUA	68	-7.603	-40.886	8.093	1.00	0.00
ATOM	586	04'	GUA	68	-8.925	-40.385	8.052	1.00	0.00
ATOM	587	C1'	GUA	68	-8.931	-39.220	7.256	1.00	0.00
ATOM	588	N9	GUA	68	-10.147	-38.427	7.547	1.00	0.00
ATOM	589	C8	GUA	68	-10.640	-38.067	8.774	1.00	0.00
ATOM	590	N7	GUA	68	-11.747	-37.379	8.728	1.00	0.00
ATOM	591	C5	GUA	68	-12.010	-37.267	7.367	1.00	0.00
ATOM	592	C6	GUA	68	-13.078	-36.601	6.690	1.00	0.00
ATOM	593	06	GUA	68	-14.028	-35.996	7.182	1.00	0.00
ATOM	594	N1	GUA	68	-12.954	-36.678	5.308	1.00	0.00
ATOM	595	C2	GUA	68	-11.937	-37.337	4.647	1.00	0.00
ATOM	596	N2	GUA	68	-11.930	-37.298	3.312	1.00	0.00
ATOM	597	N3	GUA	68	-10.943	-37.975	5.279	1.00	0.00
ATOM	598	C4	GUA	68	-11.034	-37.901	6.635	1.00	0.00
ATOM	599	C3'	GUA	68	-6.689	-39.649	8.109	1.00	0.00
ATOM	600	C2'	GUA	68	-7.670	-38.523	7.747	1.00	0.00
ATOM	601	03'	GUA	68	-5.658	-39.866	7.153	1.00	0.00
ATOM	602	P	THY	69	-4.491	-38.791	6.823	1.00	0.00
ATOM	603	0P1	THY	69	-4.060	-38.154	8.087	1.00	0.00
ATOM	604	0P2	THY	69	-3.493	-39.442	5.946	1.00	0.00
ATOM	605	05'	THY	69	-5.265	-37.691	5.942	1.00	0.00
ATOM	606	C5 <b>'</b>	THY	69	-6.041	-38.078	4.824	1.00	0.00
ATOM	607	C4'	THY	69	-7.026	-36.981	4.418	1.00	0.00
ATOM	608	04'	THY	69	-8.104	-36.716	5.283	1.00	0.00
ATOM	609	C1'	THY	69	-8.672	-35.500	4.861	1.00	0.00
ATOM	610	N1	THY	69		-34.956	5.870	1.00	0.00
ATOM	611	C6	THY	69	-9.331	-35.091	7.207	1.00	0.00
ATOM	612	C5	THY	69	-10.138	-34.543	8.147	1.00	0.00

	817				(110)				818
<b>АТОИ</b>	613	С7	THY	69	-9.720 -	24 742	9.593	1.00	0.00
ATOM				69	-11.336 -				0.00
ATOM	614	C4	THY				7.785	1.00	
ATOM	615	04	THY	69	-12.123 -		8.566	1.00	0.00
ATOM	616	N3	THY	69	-11.558 -		6.419	1.00	0.00
ATOM	617	C2	THY	69	-10.736 -		5.432	1.00	0.00
ATOM	618	02	THY	69	-11.005 -		4.245	1.00	0.00
ATOM	619	C3'	THY	69	-6.391 -		4.157	1.00	0.00
ATOM	620	C2'	THY	69	-7.410 -		4.786	1.00	0.00
ATOM	621	03'	THY	69	-6.222 -		2.771	1.00	0.00
ATOM	622	P	THY	70	-5.552 -		2.192	1.00	0.00
ATOM	623		THY	70	-5.134 -		3.319	1.00	0.00
ATOM	624		THY	70	-4.569 -		1.147	1.00	0.00
ATOM	625		THY	70	-6.782 -		1.503	1.00	0.00
ATOM	626	C5'	THY	70	-7.478 -		0.394	1.00	0.00
ATOM	627	C4'	THY	70	-8.653 -		0.100	1.00	0.00
ATOM	628	04'	THY	70	-9.438 -	32.780	1.274	1.00	0.00
ATOM	629	C1'	THY	70	-9.921 -		1.439	1.00	0.00
ATOM	630	N1	THY	70	-10.114 -		2.893	1.00	0.00
ATOM	631	C6	THY	70	-9.083 -	31.429	3.776	1.00	0.00
ATOM	632	C5	THY	70	-9.238 -	31.241	5.112	1.00	0.00
ATOM	633	C7	THY	70	-8.033 -	31.487	6.002	1.00	0.00
ATOM	634	C4	THY	70	-10.506 -	30.821	5.668	1.00	0.00
ATOM	635	04	THY	70	-10.738 -	30.642	6.860	1.00	0.00
ATOM	636	N3	THY	70	-11.498 -	30.632	4.723	1.00	0.00
ATOM	637	C2	THY	70	-11.358 -	30.770	3.350	1.00	0.00
ATOM	638	02	THY	70	-12.294 -	30.494	2.603	1.00	0.00
ATOM	639	C3 <b>'</b>	THY	70	-8.164 -	31.470	-0.231	1.00	0.00
ATOM	640	C2'	THY	70	-8.823 -	-30.595	0.838	1.00	0.00
ATOM	641	03'	THY	70	-8.507 -	31.114	-1.556	1.00	0.00
ATOM	642	P	ADE	71	-7.947 -	-29.765	-2.244	1.00	0.00
ATOM	643	0P1	ADE	71	-6.617 -	-29.452	-1.667	1.00	0.00
ATOM	644		ADE	71	-8.107 -	-29.887	-3.708	1.00	0.00
ATOM	645	05'	ADE	71	-8.981 -	-28.667	-1.709	1.00	0.00
ATOM	646	C5'	ADE	71	-10.342 -	-28.666	-2.089	1.00	0.00
ATOM	647	C4'	ADE	71	-11.102 -	-27.627	-1.256	1.00	0.00
ATOM	648	04'	ADE	71	-11.323 -	-28.089	0.078	1.00	0.00
ATOM	649	C1'	ADE	71	-11.084 -	-27.010	0.958	1.00	0.00
ATOM	650	N9	ADE	71	-10.844 -		2.368	1.00	0.00
ATOM	651	C8	ADE	71	-9.683 -		2.907	1.00	0.00
ATOM	652	N7	ADE	71	-9.660 -		4.203	1.00	0.00
ATOM	653	C5	ADE	71	-10.910 -	-27.473	4.560	1.00	0.00
ATOM	654	C6	ADE	71	-11.505 -		5.810	1.00	0.00
ATOM	655	N6	ADE	71	-10.860		6.948	1.00	0.00
ATOM	656	N1	ADE	71	-12.733 -		5.852	1.00	0.00
ATOM	657	C2	ADE	71	-13.345 -		4.702	1.00	0.00
ATOM	658	N3	ADE	71	-12.896 -		3.462	1.00	0.00
ATOM	659		ADE	71	-11.648		3.455	1.00	0.00
ATOM	660			71	-10.305		-1.118	1.00	0.00
ATOM	661	C2'		71	-9.807 -		0.317	1.00	0.00
ATOM	662	03'	ADE	71	-11.199	-25.234	-1.248	1.00	0.00

					()			1411112000
	819							820
ATOM	663	P	GUA	72	-10.721 -23.706	-1.398	1.00	0.00
ATOM	664	0P1		72	-10.697 -23.349	-2.832	1.00	0.00
ATOM	665	0P2		72	-9.526 -23.477	-0.548	1.00	0.00
ATOM	666	05'	GUA	72	-11.973 -22.988	-0.694	1.00	0.00
ATOM	667	C5'	GUA	72	-13.302 -23.197	-1.139	1.00	0.00
ATOM	668	C4'	GUA	72	-14.294 -22.789	-0.045	1.00	0.00
ATOM	669	04'	GUA	72	-14.038 -23.520	1.148	1.00	0.00
ATOM	670	C1'	GUA	72	-13.757 -22.650	2.232	1.00	0.00
ATOM	671	N9	GUA	72	-12.666 -23.213	3.063	1.00	0.00
ATOM	672	<b>C8</b>	GUA	72	-11.468 -23.712	2.632	1.00	0.00
ATOM	673	N7	GUA	72	-10.642 -24.056	3.581	1.00	0.00
ATOM	674	C5	GUA	72	-11.362 -23.792	4.742	1.00	0.00
ATOM	675	C6	GUA	72	-10.999 -23.988	6.109	1.00	0.00
ATOM	676	06	GUA	72	-9.943 -24.435	6.551	1.00	0.00
ATOM	677	N1	GUA	72	-12.009 -23.609	6.987	1.00	0.00
ATOM	678	C2	GUA	72	-13.234 -23.104	6.596	1.00	0.00
ATOM	679	N2	GUA	72	-14.085 -22.716	7.548	1.00	0.00
ATOM	680	N3	GUA	72	-13.577 -22.924	5.313	1.00	0.00
ATOM	681	C4	GUA	72	-12.604 -23.285	4.435	1.00	0.00
ATOM	682	C3'	GUA	72	-14.179 -21.308	0.318	1.00	0.00
ATOM	683	C2'	GUA	72	-13.285 -21.367		1.00	0.00
ATOM	684	03'	GUA	72	-15.478 -20.809	0.584	1.00	0.00
ATOM	685	P	GUA	73	-15.775 -19.232	0.764	1.00	0.00
ATOM	686		GUA	73	-17.220 -19.007	0.538	1.00	0.00
ATOM	687		GUA	73	-14.781 -18.470	-0.023	1.00	0.00
ATOM	688	05'	GUA	73	-15.467 -19.000	2.323	1.00	0.00
ATOM	689	C5'	GUA	73	-16.353 -19.478	3.313	1.00	0.00
ATOM	690	C4'	GUA	73	-15.754 -19.266	4.703	1.00	0.00
ATOM	691	04'	GUA	73	-14.568 -20.025	4.856	1.00	0.00
ATOM	692	C1'	GUA	73	-13.742 -19.338	5.764	1.00	0.00
ATOM	693	N9	GUA	73	-12.356 -19.855	5.736	1.00	0.00
ATOM	694	C8	GUA	73	-11.523 -20.040	4.663	1.00	0.00
ATOM	695	N7	GUA	73	-10.365 -20.562	4.964	1.00	0.00
ATOM	696	C5	GUA	73	-10.423 -20.717	6.346	1.00	0.00
ATOM	697	C6	GUA	73	-9.454 -21.228	7.264	1.00	0.00
ATOM	698	06	GUA	73	-8.333 -21.670	7.012	1.00	0.00
ATOM	699	N1	GUA	73	-9.905 -21.197	8.582	1.00	0.00
ATOM	700	C2	GUA	73	-11.153 -20.749	8.971	1.00	0.00
ATOM	701	N2	GUA	73	-11.448 -20.723	10.272	1.00	0.00
ATOM	702	N3	GUA	73	-12.063 -20.282	8.111	1.00	0.00
ATOM	703	C4	GUA	73	-11.638 -20.285	6.822	1.00	0.00
ATOM	704	C3'	GUA	73	-15.358 -17.807	4.995	1.00	0.00
ATOM	705	C2'	GUA	73	-13.846 -17.925	5.204	1.00	0.00
ATOM	706	03'	GUA	73	-16.062 -17.392	6.153	1.00	0.00
ATOM	707	P	GUA	74	-15.918 -15.917	6.790	1.00	0.00
ATOM	708		GUA	74	-15.102 -15.078	5.884	1.00	0.00
ATOM	709		GUA	74	-17.260 -15.458	7.211	1.00	0.00
ATOM	710	05'	GUA	74	-15.052 -16.234	8.110	1.00	0.00
ATOM	711	C5'	GUA	74	-15.600 -17.007	9.162	1.00	0.00
ATOM	712	C4'		74	-14.578 -17.218	10.281	1.00	0.00
				-				

	001				(112)			141/112 0 0 0	
	821	0.43			10 100 17 000			822	
ATOM	713	04'		74	-13.423 -17.860	9.768	1.00	0.00	
ATOM	714	C1'	GUA	74	-12.275 -17.254	10.317	1.00	0.00	
ATOM	715	N9	GUA	74	-11.114 -17.437	9.423	1.00	0.00	
ATOM	716	C8	GUA	74	-11.037 -17.202	8.075	1.00	0.00	
ATOM	717	N7	GUA	74	-9.867 -17.452	7.556	1.00	0.00	
ATOM	718	C5	GUA	74	-9.108 -17.876	8.641	1.00	0.00	
ATOM	719	C6	GUA	74	-7.742 -18.283	8.706	1.00	0.00	
ATOM	720	06	GUA	74	-6.930 -18.361	7.787	1.00	0.00	
ATOM	721	N1	GUA	74	-7.347 -18.607	10.000	1.00	0.00	′
ATOM	722	C2	GUA	74	-8.174 -18.574	11.102	1.00	0.00	
ATOM	723	N2	GUA	74	-7.650 -18.897	12.287	1.00	0.00	
ATOM	724	N3	GUA	74	-9.457 -18.200	11.042	1.00	0.00	
ATOM	725	C4	GUA	74	-9.862 -17.862	9.789	1.00	0.00	
ATOM	726	C3'	GUA	74	-14.097 -15.907	10.925	1.00	0.00	
ATOM	727	C2 <b>'</b>	GUA	74	-12.682 -15.790	10.366	1.00	0.00	
ATOM	728	03'	GUA	74	-14.140 -16.074	12.331	1.00	0.00	
ATOM	729	P	THY	75	-13.682 -14.927	13.366	1.00	0.00	
ATOM	730	0P1	THY	75	-14.596 -14.958	14.529	1.00	0.00	
ATOM	731	0P2	THY	75	-13.474 -13.663	12.625	1.00	0.00	
ATOM	732	05'	THY	75	-12.245 -15.482	13.832	1.00	0.00	
ATOM	733	C5'	THY	75	-12.133 -16.718	14.511	1.00	0.00	
ATOM	734	C4'	THY	75	-10.690 -16.953	14.961	1.00	0.00	
ATOM	735	04'	THY	75	-9.824 -16.967	13.839	1.00	0.00	
ATOM	736	C1'	THY	75	-8.664 -16.211	14.113	1.00	0.00	
ATOM	737	N1	THY	75	-8.074 -15.713	12.838	1.00	0.00	
ATOM	738	C6	THY	75	-8.875 -15.097	11.902	1.00	0.00	
ATOM	739	C5	THY	75	-8.386 -14.730	10.690	1.00	0.00	
ATOM	740	<b>C7</b>	THY	75	-9.364 -14.039	9.757	1.00	0.00	
ATOM	741	C4	THY	75	-7.010 -14.992	10.316	1.00	0.00	
ATOM	742	04	THY	75	-6.497 -14.747	9.227	1.00	0.00	
ATOM	743	N3	THY	75	-6.265 -15.592	11.316	1.00	0.00	
ATOM	744	C2	THY	75	-6.725 -15.961	12.570	1.00	0.00	
ATOM	745	02	THY	75	-5.955 -16.484	13.374	1.00	0.00	
ATOM	746	C3'	THY	75	-10.186 -15.836	15.885	1.00	0.00	
ATOM	747	C2'	THY	75	-9.215 -15.080	14.977	1.00	0.00	
ATOM	748	03'	THY	75	-9.565 -16.430	17.011	1.00	0.00	
ATOM	749	P	THY	76	-8.959 -15.559	18.225	1.00	0.00	
ATOM	750	0P1	THY	76	-9.080 -16.345	19.472	1.00	0.00	
ATOM	751	0P2	THY	76	-9.505 -14.186	18.160	1.00	0.00	
ATOM	752	05'	THY	76	-7.409 -15.502	17.814	1.00	0.00	
ATOM	753	C5'	THY	76	-6.599 -16.659	17.868	1.00	0.00	
ATOM	754	C4'	THY	76	-5.159 -16.291	17.508	1.00	0.00	
ATOM	755	04'	THY	76	-5.090 -15.871	16.155	1.00	0.00	
ATOM	756	C1'	THY	76	-4.287 -14.714	16.068	1.00	0.00	
ATOM	757	N1	THY	76	-4.540 -14.013	14.775	1.00	0.00	
ATOM	758	C6	THY	76	-5.713 -13.328	14.557	1.00	0.00	
ATOM	759	C5	THY	76	-5.975 -12.747	13.360	1.00	0.00	
ATOM	760	C7	THY	76	-7.308 -12.030	13.252	1.00	0.00	
ATOM	761	C4	THY	76	-5.039 -12.816	12.257	1.00	0.00	
ATOM	762	04	THY	76	-5.194 -12.295	11.159	1.00	0.00	

```
823
                                                                   824
ATOM
        763 N3
                                  -3.908 -13.571 12.527 1.00 0.00
                 THY
                         76
ATOM
        764
             C2
                 THY
                         76
                                 -3.620 -14.190 13.735
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        765
             02
                 THY
                         76
                                  -2.604 -14.878 13.843
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        766
             C3'
                 THY
                         76
                                  -4.648 -15.111 18.348
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                                          1.00
             C2' THY
                                  -4.692 -13.961
                                                  17.339
                                                                 0.00
ATOM
        767
                         76
ATOM
        768
             03'
                 THY
                         76
                                  -3.324 -15.386
                                                 18.753
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        769
             P
                  ADE
                         77
                                  -2.690 -14.730
                                                  20.081
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        770
             OP1 ADE
                         77
                                  -3.182 -13.342
                                                  20.217
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        771
             OP2 ADE
                         77
                                  -2.843 -15.693
                                                  21.195
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        772
             05'
                 ADE
                         77
                                  -1.148 -14.674
                                                  19.659
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        773
             C5'
                 ADE
                         77
                                  -0.380 -15.853
                                                  19.544
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        774
              C4'
                 ADE
                         77
                                   0.837 - 15.574
                                                   18.664
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        775
             04'
                 ADE
                         77
                                   0.381 - 15.238
                                                  17.359
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        776
             C1'
                 ADE
                         77
                                   0.931 - 14.009
                                                  16.927
                                                           1.00
                                                                 0.00
              N9
ATOM
        777
                  ADE
                         77
                                  -0.074 -13.261
                                                   16.132
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        778
              68
                  ADE
                         77
                                  -1.291 -12.782
                                                   16.553
                                                           1.00
                                                                 0.00
        779
             N7
                  ADE
                                                   15.653
ATOM
                         77
                                  -1.954 -12.114
                                                           1.00
              C5
                  ADE
ATOM
        780
                         77
                                  -1.121 -12.158
                                                  14.544
                                                          1.00
                                                                 0.00
              60
                  ADE
ATOM
        781
                         77
                                  -1.241 -11.628
                                                  13.247
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              N6
                  ADE
                                  -2.285 -10.881
                                                   12.885
        782
                         77
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                                   12.357
ATOM
        783
              N1
                  ADE
                         77
                                  -0.260 -11.867
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        784
              C2
                  ADE
                         77
                                   0.792 - 12.587
                                                  12.744
                                                           1.00
                                                                 0.00
              N3
                  ADE
                         77
                                                  13.936
ATOM
        785
                                   1.029 -13.132
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        786
              C4
                  ADE
                         77
                                   0.018 - 12.875
                                                   14.811
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C3'
                  ADE
ATOM
        787
                         77
                                   1.666 -14.390
                                                   19.179
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        788
              C2'
                  ADE
                         77
                                   1.256 -13.269
                                                   18.224
                                                           1.00
                                                                  0.00
              03'
ATOM
        789
                 ADE
                         77
                                   3.033 -14.747
                                                   19.131
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        790
              P
                  GUA
                         78
                                   4.210 -13.725
                                                   19.525
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              OP1 GUA
        791
                         78
                                   3.694 -12.662
                                                   20.419
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              OP2 GUA
                                                   19.912
        792
                         78
                                   5.417 -14.483
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
        793
              05' GUA
                                   4.482 -13.050
                                                   18.102
                         78
                                                          1.00
                                                                  0.00
ATOM
         794
              C5'
                 GUA
                                   4.911 -13.831
                                                   17.008
                          78
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         795
              C4'
                  GUA
                         78
                                   5.004 -12.963
                                                   15.762
                                                           1.00
                                                                  0.00
              04'
                  GUA
ATOM
         796
                          78
                                   3.754 - 12.390
                                                   15.448
                                                           1.00
                                                                  0.00
         797
              C1'
                  GUA
                                   3.989 -11.168
                                                   14.786
ATOM
                          78
                                                           1.00
                                                                  0.00
         798
              N9
                  GUA
                          78
                                   2.748 - 10.363
                                                   14.815
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
                  GUA
ATOM
         799
              68
                          78
                                   1.923 -10.130
                                                   15.883
                                                           1.00
                                                                  0.00
              N7
                  GUA
ATOM
         800
                          78
                                   0.825
                                         -9.495
                                                   15.586
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         801
              C5
                  GUA
                                   0.938 - 9.263
                                                   14.220
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          78
                  GUA
ATOM
         802
              C6
                          78
                                   0.047 - 8.602
                                                   13.321
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         803
              06
                  GUA
                          78
                                  -1.043
                                          -8.092
                                                   13.569
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              N1
                  GUA
                                          -8.561
                                                   12.021
                                                           1.00
                                                                  0.00
         804
                          78
                                   0.538
ATOM
         805
              C2
                  GUA
                          78
                                   1.743
                                          -9.099
                                                   11.623
                                                           1.00
                                                                  0.00
              N2
                  GUA
                                          -8.916
ATOM
         806
                          78
                                   2.114
                                                   10.356
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         807
              N3
                  GUA
                          78
                                   2.578
                                          -9.732
                                                   12.460
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         808
              C4
                  GUA
                          78
                                   2.120 -9.778
                                                   13.740
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C3'
                  GUA
ATOM
         809
                          78
                                   5.966 -11.790
                                                   15.971
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C2'
                  GUA
                                   5.089 ~10.572
                                                   15.659
ATOM
         810
                          78
                                                           1.00
                                                                  0.00
              03'
                  GUA
                                   7.050 -11.988
ATOM
         811
                          78
                                                   15.089
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         812
             P
                  GUA
                          79
                                   8.372 -11.078
                                                  15.123
                                                          1.00
                                                                  0.00
```

•		005				(414)				171#12003 13
	1 TO 11	825	0.01	0111	70	0 400	40 455	40 40		826
	ATOM	813	0P1		79		-10.475	16.467	1.00	0.00
	ATOM	814		GUA	79		-11.904	14.580	1.00	0.00
	ATOM	815	05'	GUA	79		-9.927	14.064	1.00	0.00
	ATOM	816	C5'	GUA	· 79	7.828	-10.228	12.692	1.00	0.00
	ATOM	817	C4'	GUA	79	7.149	-9.070	11.958	1.00	0.00
	ATOM	818	04'	GUA	79	5.865	-8.806	12.497	1.00	0.00
	ATOM	819	C1'	GUA	79	5.568	-7.451	12.247	1.00	0.00
	ATOM	820	N9	GUA	79	4.429	-7.000	13.079	1.00	0.00
	ATOM	821	С8	GUA	79	4.251	-7.153	14.431	1.00	0.00
	ATOM	822	N7	GUA	79	3.104	-6.722	14.875	1.00	0.00
	ATOM	823	C5	GUA	79		-6.231	13.738	1.00	0.00
	ATOM	824	C6	GUA	79	1.181	-5.644	13.585	1.00	0.00
	ATOM	825	06	GUA	79	0.332	-5.434	14.449	1.00	0.00
	ATOM	826	N1	GUA	79	0.907	-5.298	12.267	1.00	0.00
	ATOM	827	C2	GUA	79		-5.479	11.213	1.00	0.00
	ATOM	828	N2	GUA	79	1.386	-5.060	10.009	1.00	0.00
	ATOM	829	N3	GUA	79	2.995	-6.025			
	ATOM	830	N3	GUA	79	3.281	-6.385	11.354 12.635	1.00	0.00
			C3'	GUA					1.00	0.00
	ATÓM	831	C2'		79 70	7.917	-7.740	12.046	1.00	0.00
	ATOM	832		GUA	79 70		-6.800	12.670	1.00	0.00
	ATOM	833	03'	GUA	79	8.313	-7.370	10.736	1.00	0.00
	ATOM	834	P	GUA	80	9.151	-6.027	10.422	1.00	0.00
	ATOM	835		GUA	80	9.799	-5.563	11.668	1.00	0.00
	ATOM	836		GUA	80	9.967	-6.262	9.210	1.00	0.00
	ATOM	837	05'		80	7.980	-4.993	10.044	1.00	0.00
	ATOM	838	C5'	GUA	80		-5.169	8.871	1.00	0.00
	ATOM	839	C4'	GUA	80		-4.105	8.790	1.00	0.00
	ATOM	840	04'	GUA	80	5.249	-4.221	9.903	1.00	0.00
	ATOM	841	C1'	GUA	80	4.846	-2.926	10.286	1.00	0.00
	ATOM	842	N9	GUA	80	4.303	-2.938	11.660	1.00	0.00
	ATOM	843	C8	GUA	80		-3.374	12.812	1.00	0.00
	ATOM	844	N7	GUA	80		-3.305	13.869	1.00	0.00
	ATOM	845	C5	GUA	80	2.945	-2.790	13.385	1.00	0.00
	ATOM	846	C6	GUA	80		-2.529	14.060	1.00	0.00
	ATOM	847	06	GUA	80	1.447	-2.693	15.247	1.00	0.00
	ATOM	848	N1	GUA	80	0.728	-2.064	13.198	1.00	0.00
	ATOM	849	C2	GUA	80	0.897	-1.863	11.845	1.00	0.00
	ATOM	850	N2	GUA	80	-0.151	-1.417	11.149	1.00	0.00
	ATOM	851	N3	GUA	80	2.053	-2.099	11.209	1.00	0.00
	ATOM	852	C4	GUA	80	3.033	-2.566	12.032	1.00	0.00
	ATOM	853	C3'	GUA	80	6.662	-2.668	8.834	1.00	0.00
	ATOM	854	C2'	GUA	80	6.160	-2.158	10.181	1.00	0.00
	ATOM	855	03'	GUA	80	6.098	-1.893	7.797	1.00	0.00
	ATOM	856	05'	CYT	81	-8.025	0.634	16.181	1.00	0.00
	ATOM	857	C5'	CYT	81	-7.714	1.572	15.170	1.00	0.00
	ATOM	858	C4'	CYT	81	-6.723	0.980	14.162	1.00	0.00
	ATOM	859	04'	CYT	81	-5.544	0.535	14.799	1.00	0.00
	ATOM	860	C1'	CYT	81	-4.894	-0.328	13.893	1.00	0.00
	ATOM	861	N1	CYT	81	-3.880	-1.173	14.570	1.00	0.00
	ATOM	862	C6	CYT	81	-4.177	-1.775	15.767	1.00	0.00

	827								828
ATOM	863	C5	CYT	81	-3.307	-2.612	16.375	1.00	0.00
ATOM	864		CYT	81	-2.050	-2.832	15.719	1.00	0.00
ATOM	865		CYT	81	-1.135	-3.638	16.258	1.00	0.00
ATOM	866	N3	CYT	81	-1.776	-2.256	14.541	1.00	0.00
ATOM	867	C2	CYT	81	-2.671	-1.436	13.926	1.00	0.00
ATOM	868	02	CYT	81	-2.402	-0.956	12.828	1.00	0.00
ATOM	869	C3'	CYT	81	-7.256	-0.256	13.421	1.00	0.00
ATOM	870	C2'	CYT	81	-6.044	-1.189	13.393	1.00	0.00
ATOM	871	03'	CYT	81	-7.708	0.126	12:133	1.00	0.00
ATOM	872	P	CYT	82	-8.302	-0.934	11.065	1.00	0.00
ATOM	873		CYT	82	-9.249	-0.215	10.185	1.00	0.00
ATOM	874		CYT	82	-8.749	-2.136	11.803	1.00	0.00
ATOM	875	05'	CYT	82	-7.006	-1.339	10.190	1.00	0.00
ATOM	876	C5'	CYT	82	-6.367	-0.403	9.342	1.00	0.00
ATOM	877	C4'	CYT	82	-5.162	-1.041	8.637	1.00	0.00
ATOM	878	04'	CYT	82	-4.227	-1.498	9.594	1.00	0.00
ATOM	879	C1'	CYT	82	-3.712	-2.761	9.220	1.00	0.00
ATOM	880	N1	CYT	82 -	-3.386	-3.499	10.464	1.00	0.00
ATOM	881	C6	CYT	82	-4.352	-3.622	11.424	1.00	0.00
ATOM	882	C5	CYT	82	-4.124	-4.244	12.594	1.00	0.00
ATOM	883	C4	CYT	82	-2.808	-4.776	12.798	1.00	0.00
ATOM	884	N4	CYT	82	-2.519	-5.443	13.917	1.00	0.00
ATOM	885	N3	CYT	82	-1.860	-4.657	11.855	1.00	0.00
ATOM	886	C2	CYT	82	-2.115	-4.032	10.668	1.00	0.00
ATOM	887	02	CYT	82	-1.238	-3.965	9.809	1.00	0.00
ATOM	888	€3'	CYT	82	-5.542	-2.256	7.778	1.00	0.00
ATOM	889	C2'	CYT	82	-4.889	-3.425	8.505	1.00	0.00
ATOM	890	03'	CYT	82	-5.046	-2.054	6.461	1.00	0.00
ATOM	891	P	CYT	83	-5.366	-3.061	5.240	1.00	0.00
ATOM	892		CYT	83	-6.581	-3.836	5.576	1.00	0.00
ATOM	893		CYT	83	-5.312	-2.288	3.979	1.00	0.00
ATOM	894	05'	CYT	83	-4.108	-4.067	5.266	1.00	0.00
ATOM	895	C5'	CYT	83 ~	-2.841	-3.682	4.762	1.00	0.00
ATOM	896	C4'	CYT	83	-1.800	-4.752	5.103	1.00	0.00
ATOM	897	04'	CYT	83	-1.809	-4.959	6.500	1.00	0.00
ATOM	898	C1'	CYT	83	-1.267	-6.227	6.784	1.00	0.00
ATOM	899	N1	CYT	83	-1.824	-6.717	8.070	1.00	0.00
ATOM	900	C6	CYT	83	-3.156	-6.542	8.332	1.00	0.00
ATOM	901	C5	CYT	83	-3.695	-6.854	9.531	1.00	0.00
ATOM	902	C4	CYT	83	-2.805	-7.412	10.510	1.00	0.00
ATOM	903	N4	CYT	83	-3.260	-7.747	11.719	1.00	0.00
ATOM ATOM	904 905	N3 C2	CYT	83	-1.513	-7.635	10.231	1.00	0.00
ATOM	906	02	CYT CYT	83 83	-0.989 0.187	-7.310 -7.561	9.013	1.00	0.00
ATOM	907	02 C3'	CYT	83	-2.106	-6.127	8.763 4.492	1.00	0.00
ATOM	908	C2'	CYT	83	-1.751	-7.095	5.626	1.00	0.00
ATOM	909	03'	CYT	83	-1.731	-6.339	3.318	1.00	0.00
ATOM	910	P	THY	84	-1.477	-7.677	2.413	1.00	0.00
ATOM	911		THY	84	-0.834	-7.425	1.105	1.00	0.00
ATOM	912		THY	84	-2.881	-8.141	2.460	1.00	0.00
	_	_				· <del>-</del>			

	020				(110)				111111111111111111111111111111111111111	1 3 3
ATOH	829	٥٢,	TIBI	0.4	0.570	0.750	0.000	1 00	830	
ATOM	913		THY	84	-0.578		3.206	1.00	0.00	
ATOM	914	C5'	THY	84	0.834		3.235	1.00	0.00	
ATOM	915	C4'	THY	84	1.422		4.283	1.00	0.00	
ATOM	916	04'	THY	84		-9.258	5.598	1.00	0.00	
ATOM	917	C1'	THY	84		-10.370	6.456	1.00	0.00	
ATOM	918	N1	THY	84		-10.555	7.384	1.00	0.00	
ATOM	919	C6	THY	84	-1.202		6.972	1.00	0.00	
ATOM	920	C5	THY	84		-10.375	7.848	1.00	0.00	
ATOM	921	C7	THY	84		-10.122	7.287	1.00	0.00	
ATOM	922	C4	THY	84	-2.023		9.248	1.00	0.00	
ATOM	923	04	THY	84		-10.652	10.121	1.00	0.00	
ATOM	924	N3	THY	84		-11.037	9.558	1.00	0.00	
ATOM	925	C2	THY	84		-11.031	8.671	1.00	0.00	
ATOM	926	02	THY	84		-11.446	9.021	1.00	0.00	
ATOM	927	C3'	THY	84		-11.037	4.171	1.00	0.00	
ATOM	928	C2'	THY	84		-11.566	5.515	1.00	0.00	
ATOM	929	03'	THY	84		-11.703	3.055	1.00	0.00	
ATOM	930	P	ADE	85		-13.162	2.603	1.00	0.00	
ATOM	931		ADE	85		-13.179	2.705	1.00	0.00	
ATOM	932		ADE	85		-13.508	1.315	1.00	0.00	
ATOM	933		ADE	85		-14.131	3.738	1.00	0.00	
ATOM	934		ADE	85		-14.241	3.958	1.00	0.00	
ATOM	935	C4'	ADE	85		-14.985	5.271	1.00	0.00	
ATOM	936	04'	ADE	85		-14.511	6.296	1.00	0.00	
ATOM	937	C1'	ADE	85		-15.545	6.787	1.00	0.00	
ATOM	938	N9	ADE	85	0.119	-15.021	7.034	1.00	0.00	
ATOM	939	C8	ADE	85	-0.821	-14.621	6.113	1.00	0.00	
ATOM	940	N7	ADE	85	-1.919	-14.148	6.627	1.00	0.00	
ATOM	941	C5	ADE	85	-1.696	-14.237	7.993	1.00	0.00	
ATOM	942	C6	ADE	85	-2.487	-13.892	9.102	1.00	0.00	
ATOM	943	N6	ADE	85	-3.715	-13.395	8.955	1.00	0.00	
ATOM	944	N1	ADE	85		-14.084		1.00	0.00	
ATOM	945	C2	ADE	85		-14.607	10.460	1.00	0.00	
ATOM	946	N3	ADE	85		-14.991	9.499	1.00	0.00	
ATOM	947	C4	ADE	85		-14.767	8.261	1.00	0.00	
ATOM	948	C3'		85		-16.483	5.147	1.00	0.00	
ATOM	949	C2'		85 2 <b>.</b>		-16.609	5.690	1.00	0.00	
ATOM	950		ADE	85		-17.156	5.939	1.00	0.00	
ATOM	951	P	ADE	86		-18.750	5.914	1.00	0.00	
ATOM	952		ADE	86		-19.056	6.024	1.00	0.00	
ATOM	953		ADE	86		-19.274	4.755	1.00	0.00	
ATOM	954	05'		86		-19.203	7.264	1.00	0.00	
ATOM	955	C5'	ADE	86		-18.935	8.511	1.00	0.00	
ATOM	956	C4'	ADE	86		-19.257	9.652	1.00	0.00	
ATOM	957	04'	ADE	86		-18.504	9.493	1.00	0.00	
ATOM	958	C1'	ADE	86 ec		-19.297	9.839	1.00	0.00	
ATOM	959	N9	ADE	86 oc		-18.745	9.154	1.00	0.00	
ATOM	960	C8	ADE	86 86		-18.700	7.805	1.00	0.00	
ATOM	961	N7	ADE	86 86		-18.071	7.480	1.00	0.00	
ATOM	962	C5	ADE	86	-2.399	-17.665	8.705	1.00	0.00	

	204				(111)			000
1 TOIL	831	00	100	00	0.500 10.050	0.004	1 00	832
ATOM	963	C6	ADE	86	-3.563 -16.958		1.00	0.00
ATOM	964	N6	ADE	86	-4.445 -16.518		1.00	0.00
ATOM	965	N1	ADE	86	-3.777 -16.691		1.00	0.00
ATOM	966	C2	ADE	86	-2.889 -17.110		1.00	0.00
ATOM	967	N3	ADE	86	-1.767 -17.794		1.00	0.00
ATOM	968	C4	ADE	86	-1.575 -18.048		1.00	0.00
ATOM	969	C3'	ADE	86	2.546 -20.738		1.00	0.00
ATOM	970	C2'	ADE	86	1.067 -20.675	9.320	1.00	0.00
ATOM	971	03'	ADE	86	2.802 -21.220	11.015	1.00	0.00
ATOM	972	P	CYT	87	2.484 -22.732	11.477	1.00	0.00
ATOM	973	0P1	CYT	87	2.433 -23.590	10.268	1.00	0.00
ATOM	974	0P2	CYT	87	3.433 -23.074	12.558	1.00	0.00
ATOM	975	05'	CYT	87	1.009 -22.551	12.120	1.00	0.00
ATOM	976	C5'	CYT	87	0.867 -21.811	13.323	1.00	0.00
ATOM	977	C4'	CYT	87	-0.518 -21.198	3 13.543	1.00	0.00
ATOM	978	04'	CYT	87	-1.092 -20.709	12.351	1.00	0.00
ATOM	979	C1'	CYT	87	-2.497 -20.751	12.478	1.00	0.00
ATOM	980	N1	CYT	87	-3.139 -20.729	11.141	1.00	0.00
ATOM	981	C6	CYT	87	-2.542 -21.358	10.079	1.00	0.00
ATOM	982	C5	CYT	87	-3.014 -21.217	8.820	1.00	0.00
ATOM	983	C4	CYT	87	-4.187 -20.411	8.648	1.00	0.00
ATOM	984	N4		. 87	-4.726 -20.224		1.00	0.00
ATOM	985	N3	CYT	87	-4.794 -19.846		1.00	0.00
ATOM	986	C2	CYT	87	-4.308 -19.998		1.00	0.00
ATOM	987	02	CYT	87	-4.904 -19.492		1.00	0.00
ATOM	988	C3'	CYT	87	-1.580 -22.086		1.00	0.00
ATOM	989	C2'	CYT	87	-2.695 -22.087		1.00	0.00
ATOM	990	03'	CYT	87	-1.968 -21.417		1.00	0.00
ATOM	991	P	CYT	88	-2.747 -22.130		1.00	0.00
ATOM	992		CYT		-2.203 -23.492		1.00	0.00
ATOM	993		CYT.	88	-2.706 -21.178		1.00	0.00
ATOM	994	05'	CYT	88	-4.268 -22.226		1.00	0.00
ATOM	995	C5'	CYT	88	-5.197 -21.196		1.00	0.00
ATOM	996	C4'	CYT	88	-6.491 -21.380		1.00	0.00
ATOM	997	04'	CYT	88	-6.227 -21.339		1.00	0.00
ATOM	998	C1'	CYT	88	-7.348 -21.892		1.00	0.00
ATOM	999	N1	CYT	88	-7.003 -22.274		1.00	0.00
ATOM	1000	C6	CYT	88	-5.817 -22.904		1.00	0.00
ATOM	1001	C5	CYT	88	-5.425 -23.190		1.00	0.00
ATOM	1002	C4	CYT	88	-6.330 -22.817		1.00	0.00
ATOM	1003	N4	CYT	88	-6.039 -23.032		1.00	0.00
ATOM	1004	N3	CYT	88	-7.520 -22.26		1.00	0.00
ATOM	1005	C2	CYT	88	-7.893 -21.996		1.00	0.00
ATOM	1006	02	CYT	88	-9.006 -21.533		1.00	0.00
ATOM	1007	C3'	CYT	88	-7.213 -22.720		1.00	0.00
ATOM	1008	C2'	CYT	88	-7.638 -23.12		1.00	0.00
ATOM	1009	03'	CYT	88	-8.300 -22.51		1.00	0.00
ATOM	1010	P	CYT	89	-9.357 -23.678		1.00	0.00
ATOM	1011		CYT	89	-8.741 -24.99		1.00	0.00
ATOM	1012		CYT	89	-9.878 -23.398		1.00	0.00
	_							

833 834 ATOM 1013 05' CYT 89 -10.550 -23.436 16.032 1.00 0.00 1014 C5' CYT 89 -11.353 -22.268 16.075 1.00 0.00 ATOM ATOM 1015 C4' CYT 89 -12.391 -22.287 14.945 1.00 0.00 0.00 ATOM 1016 04' CYT 89 -11.740 -22.371 13.693 1.00 ATOM 1017 C1' CYT 89 -12.506 -23.150 12.796 1.00 0.00 1018 N1 CYT -11.583 -23.798 11.834 ATOM 89 1.00 0.00 ATOM 1019 C6 CYT 89 -10.418 -24.344 12.299 1.00 0.00 0.00 ATOM CYT -9.472 -24.826 11.471 1.00 1020 C5 89 ATOM 1021 C4 CYT 89 -9.757 -24.753 10.061 1.00 0.00 ATOM 1022 N4 CYT 89 -8.862 -25.167 9.163 1.00 0.00 ATOM 1023 N3 CYT 89 -10.933 -24.291 9.612 1.00 0.00 CYT -11.879 -23.820 ATOM 1024 C2 89 10.474 1.00 0.00 ATOM 1025 02 CYT 89 -12.961 -23.429 10.043 1.00 0.00 C3' CYT -13.345 -23.490 15.021 ATOM 1026 89 1.00 0.00 ATOM 1027 C2' CYT 89 -13.129 -24.209 13.694 1.00 0.00 03' CYT -14.672 -23.016 15.201 ATOM 1028 89 1.00 0.00 ATOM 1029 P THY 90 -15.964 -23.990 15.252 1.00 0.00 1030 OP1 THY -15.512 -25.362 15.571 1.00 **ATOM** 90 0.00ATOM 1031 OP2 THY 90 -16.997 -23.340 16.090 1.00 0.00 ATOM 1032 05' THY -16.476 -23.973 13.724 1.00 0.00 90 **ATOM** 1033 C5' THY -16.922 -22.777 13.112 1.00 0.00 90 **ATOM** 1034 C4' THY -17.263 -23.026 11.640 1.00 0.00 90 ATOM 1035 04' THY 90 -16.138 -23.584 10.988 1.00 0.00 ATOM 1036 C1' THY 90 -16.546 -24.590 10.086 1.00 0.00 **ATOM** 1037 N1 THY 90 -15.414 -25.542 9.923 1.00 0.00 THY 0.00 ATOM 1038 C6 90 -14.840 -26.107 11.036 1.00 ATOM 1039 C5 THY 90 -13.708 -26.845 10.949 1.00 0.00 0.00 THY -13.171 -27.431 12.241 1.00 ATOM 1040 C7 90 ATOM 1041 C4THY 90 -13.046 -27.0619.682 1.00 0.00 **ATOM** 1042 04 THY 90 -12.002 -27.6889.532 1.00 0.00 ATOM 1043 N3 THY 90 -13.695 -26.488 8.598 1.00 0.00 C2 THY -14.879 -25.764 8.652 1.00 0.00 ATOM 1044 90 1045 02 THY -15.414 -25.376 7.618 1.00 0.00 ATOM 90 **ATOM** 1046 C3' THY -18.421 -24.017 11.449 1.00 0.00 90 C2' ATOM 1047 THY 90 -17.742 -25.224 10.800 1.00 0.00 03' THY ATOM 1048 90 -19.405 -23.416 10.621 1.00 0.00 ADE -20.852 -24.086 0.00 ATOM 1049 P 91 10.367 1.00 ATOM 1050 OP1 ADE 91 -21.194 -24.930 11.533 1.00 0.00 1051 OP2 ADE -21.782 -23.020 9.934 1.00 0.00 ATOM 91 ATOM 1052 05' ADE 91 -20.577 -25.053 9.112 1.00 0.00 **ATOM** 1053 C5' ADE 91 -20.428 -24.530 7.808 1.00 0.00 ADE 0.00 ATOM 1054 C4' 91 -19.894 -25.606 6.8601.00 04' ADE -18.631 - 26.0697.282 1.00 0.00 ATOM 1055 91 ATOM 1056 C1' ADE 91 -18.403 -27.285 6.613 1.00 0.00 N9 ADE -17.304 -28.016 7.268 1.00 0.00 1057 91 ATOM ATOM 1058 68 ADE 91 -17.140 -28.275 8.603 1.00 0.00 ADE 0.00 1059 N7 91 -16.017 -28.873 8.898 1.00 ATOM ATOM 1060 C5 ADE 91 -15.405 -29.037 7.657 1.00 0.00 ATOM 1061 C6 ADE 91 -14.175 -29.593 7.254 1.00 0.00

ATOM

1062

N6 ADE 91

-13.290 -30.101

8.114 1.00 0.00

					(419)				103-135	L
	835	•••						836		
ATOM	1063	N1	ADE	91	-13.889 -29.63		1.00	0.00		
ATOM	1064	C2	ADE	91	-14.760 -29.13		1.00	0.00		
ATOM	1065	N3	ADE	91	-15.929 -28.55		1.00	0.00		
ATOM	1066	C4	ADE	91	-16.196 -28.54		1.00	0.00		
ATOM	1067	C3'	ADE	91	-20.763 -26.87		1.00	0.00		
ATOM	1068	C2'	ADE	91	-19.730 -28.00		1.00			
ATOM	1069	03'	ADE	91	-21.532 -26.79		1.00			
ATOM	1070	P	ADE	92	-22.441 -28.00		1.00	0.00		
ATOM	1071		ADE	92	-23.486 -27.43	32 4.148	1.00	0.00		
ATOM	1072		ADE	92	-22.824 -28.83	73 6.161	1.00	0.00		
MOTA	1073	05'		92	-21.393 -28.80	07 4.102	1.00	0.00		
ATOM	1074	C5'	ADE	92	-20.761 -28.17	79 3.002	1.00	0.00		
ATOM	1075	C4'	ADE	92	-19.711 -29.10	09 2.389	1.00	0.00		
ATOM	1076	04'	ADE	92	-18.721 -29.43	3.350	1.00	0.00		
ATOM	1077	C1'	ADE	92	-18.339 -30.78	3.178	1.00	0.00		
ATOM	1078	N9	ADE	92	-17.718 -31.29	95 4.423	1.00	0.00		
ATOM	1079	C8	ADE	92	-18.257 -31.30	09 5.685	1.00	0.00		
ATOM	1080	N7	ADE	92	-17.463 -31.70	6.610	1.00	0.00		
ATOM	1081	C5	ADE	92	-16.306 -32.0	36 5.911	1.00	0.00		
MOTA	1082	C6	ADE	92	-15.068 -32.6	22 6.314	1.00	0.00		
ATOM	1083	N6	ADE	92	-14.811 -32.9	32 7.586	1.00	0.00		
ATOM	1084	N1	ADE	92	-14.113 -32.8	14 5.387	1.00	0.00		
ATOM	1085	C2	ADE	92	-14.381 -32.5	01 4.121	1.00	0.00		
ATOM	1086	N3	ADE	92	-15.506 -32.0	02 3.612	1.00	0.00		
ATOM	1087	C4	ADE	92	-16.447 -31.8		1.00			
ATOM	1088	C3'	ADE	92	-20.306 -30.4		1.00	0.00		
ATOM	1089	C2'	ADE	92	-19.692 -31.4					
ATOM	1090	03'	ADE	92	-19.899 -30.6					
ATOM	1091	P	CYT	93	-20.459 -31.8					
ATOM	1092	0P1	CYT	93	-21.495 -32.6	10 0.444				
ATOM	1093		CYT	93	-20.762 -31.3		1.00			
ATOM	1094	05'	CYT	93	-19.160 -32.8		1.00			
ATOM	1095	C5'	CYT	93	-18.049 -32.4					
ATOM	1096	C4'	CYT	93	-16.908 -33.4	47 -0.964	1.00	0.00	•	
ATOM	1097	04'	CYT	93	-16.602 -33.4					
ATOM	1098	C1'	CYT	93	-16.068 -34.6	98 0.768	1.00			
ATOM	1099	N1	CYT	93	-16.276 -34.9	14 2.222	1.00			
ATOM	1100	C6	CYT	93	-17.478 -34.5		1.00			
ATOM	1101	C5	CYT	93	-17.702 -34.7		1.00			
ATOM	1102	C4	CYT	93	-16.618 -35.2		1.00			
ATOM	1103	N4	CYT	93	-16.730 -35.4		1.00			
ATOM	1104	N3	CYT	93	-15.452 -35.6		1.00			
ATOM	1105	C2	CYT	93	-15.248 -35.4		1.00			
ATOM	1106	02	CYT	93	-14.171 -35.7					
ATOM	1107		CYT	93	-17.285 -34.8					
ATOM	1108		CYT		-16.902 -35.6					
ATOM	1109				-16.562 -35.3					
END			_	•	312		•			
	R 0000	000								

1.00

1.00

28.588

27.672 1.00

28.307 1.00

3.464 -15.409 27.363 1.00

0.276 -13.462 28.416 1.00

-1.014 -13.947 28.931 1.00 0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

0.00

ATOM

ATOM

ATOM

ATOM

ATOM

ATOM

ATOM

28 0

29

30 CA ARG

31

32 CG ARG

33 CD ARG

N

CBARG

34 NE ARG

HIS

ARG

3

3.785 -16.119

2.604 -14.176

1.277 -14.615

					(421)				特開200	3-135
	839								840	
ATOM	35	CZ	ARG	4	-2.154	-13.236	28.960	1.00	0.00	
ATOM	36	NH1	ARG	4	-3.286	-13.814	29.384	1.00	0.00	
ATOM	37	NH2	ARG	4	-2.167	-11.956	28.564	1.00	0.00	
ATOM	38	C	ARG	4	4.762	-15.075	26.626	1.00	0.00	
ATOM	39	0	ARG	4	5.415	-14.074	26.925	1.00	0.00	
ATOM	40	N	ALA	5	5.115	-15.934	25.664	1.00	0.00	
ATOM	41	CA	ALA	5	6.293	-15.834	24.816	1.00	0.00	
ATOM	42	CB	ALA	5	7.324	-16.883	25.253	1.00	0.00	
ATOM	43 ·	C	ALA	5	5.881	-16.026	23.353	1.00	0.00	
ATOM	44	0	ALA	5	4.702	-16.223	23.053	1.00	0.00	
ATOM	45	N	ARG	6	6.859	-15.962	22.444	1.00	0.00	
ATOM	46	CA	ARG	6	6.639	-16.119	21.013	1.00	0.00	
ATOM	47	CB	ARG	6		-15.704	20.243	1.00		
ATOM	48	CG	ARG	6		-16.632	20.526	1.00		
ATOM	49	CD	ARG	6		-16.284	19.627	1.00		
ATOM	50		ARG	6		-17.198	19.876	1.00	0.00	
ATOM	51	CZ	ARG	6		-17.238	19.165	1.00	0.00	
ATOM	52		ARG	6		-18.138	19.472	1.00	0.00	
ATOM	53		ARG	6		-16.385	18.151	1.00		
ATOM	54	С	ARG	6		-17.550	20.649	1.00		
ATOM	55	0	ARG	6		-18.467	21.464	1.00		
ATOM	56	N	LYS	7		-17.722	19.398	1.00	0.00	
ATOM	57	CA	LYS	7		-18.976	18.792	1.00		
ATOM	58	СВ	LYS	7		-19.261	19.142	1.00		
ATOM	59	CG	LYS	7		-18.143	18.761	1.00		
ATOM	60	CD	LYS	7		-18.213	19.593	1.00		
ATOM	61	CE	LYS	7		-17.311	20.836	1.00		
ATOM	62	NZ	ĹYS	7		-15.882	20.516	1.00		
ATOM	63	С	LYS	7		-18.868	17.302	1.00		
ATOM	64	0	LYS	7		-18.452	16.992	1.00		
ATOM	65	N	ARG	8		-19.213		1.00		
ATOM	66	CA	ARG	8		-19.124		1.00		
ATOM		CB		8		-17.654				
ATOM	68	CG	ARG	8		-17.111	14.407	1.00	0.00	
ATOM	69	CD	ARG	8		-17.500	13.089	1.00		
ATOM	70	NE	ARG	8		-17.375	13.217	1.00		
ATOM	71	CZ	ARG	8	0.610	-16.875	12.321	1.00		
ATOM	72	NH1	ARG	8	-0.692	-17.015	12.574	1.00		
ATOM	73	NH2	ARG	8	1.030	-16.275	11.198	1.00		
ATOM	74	С	ARG	8	6.270	-19.847	14.430	1.00		
ATOM	75	0	ARG	8	7.324	-19.236	14.253	1.00	0.00	
ATOM	76	N	GLN	9	6.139	-21.146	14.144	1.00	0.00	
ATOM	77	CA	GLN	9	7.228	-21.917	13.577	1.00		
ATOM	78	CB	GLN	9		-23.413	13.865	1.00		
ATOM	79	CG	GLN	9		-24.242	13.391	1.00		
ATOM	80	CD	GLN	9		-25.698	13.846	1.00		
ATOM	81	0E1	GLN	9	7.098	-26.210	14.191	1.00		
ATOM	82	NE2	GLN	9	9.305	-26.382	13.853	1.00	0.00	
ATOM	83	C	GLN	9	7.233	-21.580	12.085	1.00	0.00	
ATOM	84	0	GLN	9	6.661	-22.308	11.282	1.00	0.00	

	841				(100)			842	100
ATOM	85	N	ALA	10	7.861 -20.458	11 715	1 00		
ATOM	86	CA	ALA	10	7.933 -19.978		1.00	0.00	
ATOM	87	CB	ALA	10	8.823 -18.735		1.00	0.00	
ATOM	88	С	ALA	10	8.432 -21.059		1.00	0.00	
ATOM	89	0	ALA	10	9.207 -21.933		1.00	0.00	
ATOM	90	N	TRP	11					
					7.977 -20.998		1.00	0.00	
ATOM	91	CA	TRP	11	8.356 -21.956		1.00	0.00	
ATOM	92	CB	TRP	11	7.352 -21.921		1.00	0.00	
ATOM	93	CG	TRP	11	6.012 -22.523		1.00	0.00	
ATOM	94		TRP	11	5.115 -22.067		1.00	0.00	
ATOM	95 00		TRP	11	4.000 -22.882		1.00	0.00	
ATOM	96		TRP	11	4.126 -23.912		1.00	0.00	
ATOM	97		TRP	11	3.292 -24.981		1.00	0.00	•
ATOM	98		TRP	11	3.724 -25.884		1.00	0.00	
ATOM	99		TRP	11	4.974 -25.711		1.00	0.00	
ATOM	100		TRP	11	5.800 -24.634		1.00	0.00	
ATOM	101		TRP	11	5.401 -23.707		1.00	0.00	
ATOM	102	C	TRP	11	9.785 -21.692		1.00	0.00	
ATOM	103	0	TRP	11	10.219 -20.543		1.00	0.00	
ATOM .		N	LEU	12	10.506 -22.774		1.00		
ATOM	105		LEU	12	11.893 -22.751		1.00	0.00	
ATOM	106	CB	LEU	12	12.721 -23.756		1.00	0.00	
ATOM	107		LEU	12	12.554 -23.621		1.00	0.00	
ATOM	108		LEU	12	13.452 -24.652		1.00	0.00	
ATOM	109		LEU	. 12	12.916 -22.218		1.00	0.00	
ATOM	110	C		12	11.969 -23.091		1.00		
ATOM	111	0	LEU	12	10.982 -23.554		1.00		
ATOM	112	N	TRP	13	13.145 -22.872		1.00	0.00	
ATOM	113	CA	TRP	13	13.317 -23.177		1.00	0.00	
ATOM	114	CB	TRP	13	14.724 -22.938		1.00	0.00	
ATOM	115	CG	TRP	13	15.722 -23.976		1.00		
ATOM	116		TRP		16.197 -24.024		1.00		
ATOM	117		TRP	13	17.074 -25.067		1.00		
ATOM	118		TRP	13	17.189 -25.782		1.00	0.00	
ATOM	119		TRP	13	17.923 -26.926		1.00	0.00	
ATOM	120		TRP		17.808 -27.448		1.00		
ATOM			TRP	13	16.967 -26.816		1.00		
ATOM	122		TRP	13	16.241 -25.660		1.00		
ATOM	123		TRP	13	16.330 -25.112		1.00		
ATOM	124	C	TRP	13	12.942 -24.622		1.00		
ATOM	125	0	TRP		12.090 -24.828		1.00		
ATOM	126	N	GLU	14	13.547 -25.617		1.00		
ATOM	127	CA	GLU	14	13.255 -27.008		1.00		
ATOM	128	CB	GLU	14	14.113 -27.986		1.00		
ATOM	129	CD	GLU	14	13.841 -29.397		1.00		
ATOM	130	CD	GLU	14	14.738 -30.494		1.00		
ATOM	131		GLU		14.475 -31.651		1.00		
ATOM	132	C C	GLU		15.655 -30.165		1.00		
ATOM	133		GLU		11.755 -27.289		1.00		
ATOM	134	0	GLU	14	11.278 -28.060	1.647	1.00	0.00	

	843				(120)			844
ATOM	135	N	GLU	15	11.000 -26.647	3 371	1.00	
ATOM	136	CA	GLU	15	9.566 -26.841		1.00	0.00
ATOM	137	CB	GLU -	15	8.949 -26.228		1.00	0.00
ATOM	138	CG	GLU	15	9.611 -26.756		1.00	0.00
ATOM	139	CD	GLU	15	8.792 -26.390		1.00	0.00
	,							
ATOM	140		GLU	15	9.123 -25.371		1.00	0.00
ATOM	141		GLU	15	7.845 -27.147	7.469	1.00	0.00
ATOM	142	C	GLU	15	8.916 -26.326		1.00	0.00
ATOM	143	0	GLU	15	8.266 -27.096		1.00	0.00
ATOM	144	N	ASP	16	9.087 -25.041		1.00	0.00
ATOM	145	CA	ASP	16	8.496 -24.459		1.00	0.00
ATOM	146	CB	ASP	16	8.747 -22.950		1.00	0.00
ATOM	147	CG	ASP	16	8.056 -22.237		1.00	0.00
ATOM	148		ASP		6.917 -22.623		1.00	0.00
ATOM	149		ASP	16	8.644 -21.253		1.00	0.00
ATOM	150	C	ASP	16	9.040 -25.101		1.00	0.00
ATOM	151	0	ASP	16	8.298 -25.380		1.00	0.00
ATOM	152	N	LYS	17	10.350 -25.326		1.00	0.00
ATOM	153	CA	LYS	17	11.173 -25.923		1.00	0.00
ATOM	154	CB	LYS	17	12.648 -25.972		1.00	0.00
ATOM	155	CG	LYS	17	13.606 -26.567		1.00	0.00
ATOM	156	CD	LYS	17	13.943 -25.545	-3.394	1.00	0.00
ATOM	157	CE	LYS	17	14.932 -26.101	-4.427	1.00	0.00
ATOM	158	NZ	LYS	17	16.250 -26.407	-3.839	1.00	0.00
ATOM	159	C	LYS	17	10.594 -27.308	-2.098	1.00	0.00
ATOM	160	0	LYS	17	10.197 -27.569	-3.238	1.00	0.00
ATOM	161	N	ASN	18	10.534 -28.196	-1.100	1.00	0.00
ATOM	162	CA	ASN	18	10.005 -29.544	-1.258	1.00	0.00
ATOM	163	CB	ASN	18	10.232 -30.394	-0.002	1.00	0.00
ATOM	164	CG	ASN	18	11.692 -30.752	0.277	1.00	0.00
ATOM	165		ASN	18			1.00	0.00
ATOM	166		ASN	18	11.920 -31.578		1.00	0.00
ATOM	167	C	ASN	18	8.514 -29.501	-1.596	1.00	0.00
ATOM	168	0	ASN	18	8.070 -30.250	-2.462	1.00	0.00
ATOM	169	N	LEU	19	7.740 -28.633	-0.930	1.00	0.00
ATOM	170	CA	LEU	19	6.309 -28.481	-1.172	1.00	0.00
ATOM	171	CB	LEU	19	5.735 -27.406	-0.239	1.00	0.00
ATOM	172	CG	LEU	19	4.261 -27.062	-0.502	1.00	0.00
ATOM	173		LEU	19	3.356 -28.288	-0.366	1.00	0.00
ATOM	174	CD2	LEU	19	3.824 -25.964	0.474	1.00	0.00
ATOM	175	C	LEU	19	6.066 -28.154	-2.645	1.00	0.00
ATOM	176	0	LEU	19	5.222 -28.780	-3.280	1.00	0.00
ATOM	177	N	ARG	20	6.817 -27.193	-3.193	1.00	0.00
ATOM	178	CA	ARG	20	6.732 -26.791	-4.590	1.00	0.00
ATOM	179	CB	ARG	20	7.704 -25.633	-4.852	1.00	0.00
ATOM	180	CG	ARG	20	7.670 -25.134	-6.303	1.00	0.00
ATOM	181	CD	ARG	20	8.431 -23.803	-6.402	1.00	0.00
ATOM	182	NE	ARG	20	8.553 -23.323	-7.789	1.00	0.00
ATOM	183	CZ	ARG	20	9.459 -23.754	-8.684	1.00	0.00
ATOM	184	NH1	ARG	20	10.279 -24.773	-8.392	1.00	0.00

					(424)	特開2003-1
	845					846
ATOM	185	NH2	ARG	20	9.546 -23.149 -9.874 1.0	0.00
ATOM	186	C	ARG	20	6.991 -28.014 -5.467 1.0	0.00
ATOM	187	0	ARG	20	6.231 -28.273 -6.398 1.0	0.00
ATOM	188	N	SER	21	8.042 -28.789 -5.156 1.0	0.00
ATOM	189	CA	SER	21	8.337 -30.013 -5.896 1.0	0.00
ATOM	190	CB	SER	21	9.641 -30.640 -5.387 1.0	0.00
ATOM	191	OG	SER	21	10.068 -31.687 -6.242 1.0	0.00
ATOM	192	C	SER	21	7.158 -30.995 -5.788 1.0	0 0.00
ATOM	193	0	SER	21	6.846 -31.698 -6.749 1.0	0 0.00
ATOM	194	N	GLY	22	6.502 -31.045 -4.625 1.0	0.00
ATOM	195	CA	GLY	22	5.358 -31.899 -4.350 1.0	0.00
ATOM	196	C	GLY	22	4.174 -31.538 -5.241 1.0	0.00
ATOM	197	0	GLY	22	3.679 -32.391 -5.972 1.0	0.00
ATOM	198	N	VAL	23	3.721 -30.280 -5.195 1.0	0.00
ATOM	199	CA	VAL	23	2.605 -29.810 -6.007 1.0	0.00
ATOM	200	CB	VAL	23	2.214 -28.371 -5.631 1.0	0.00
ATOM	201	CG1	VAL	23	1.053 -27.894 -6.514 1.0	0.00
ATOM	202	CG2	VAL	23	1.764 -28.304 -4.165 1.0	0.00
ATOM	203	C	VAL	23	2.950 -29.965 -7.490 1.0	0.00
ATOM	204	0	VAL	23	2.110 -30.379 -8.278 1.0	0.00
ATOM	205	N	ARG	24	4.190 -29.670 -7.885 1.0	0.00
ATOM	206	CA	ARG	24	4.624 -29.842 -9.265 1.0	0.00
ATOM	207	CB	ARG	24	6.091 -29.398 -9.365 1.0	0.00
ATOM	208	CG	ARG	24	6.723 -29.682 -10.736 1.0	0.00
ATOM	209	CD	ARG	24	8.187 -29.234 -10.788 1.0	0.00
ATOM	210	NE	ARG	24	9.007 -29.926 -9.779 1.0	0.00
ATOM	211	CZ	ARG	24	10.340 -29.817 -9.660 1.0	0.00
ATOM	212	NH1	ARG	24	11.043 -29.108 -10.553 1.0	0.00
ATOM	213	NH2	ARG	24	10.971 -30.420 -8.643 1.0	0.00
ATOM	214	C	ARG	24	4.458 -31.309 -9.694 1.0	0.00
ATOM	215	0	ARG	24	4.080 -31.588 -10.829 1.0	0.00
ATOM	216	N	LYS	25	4.769 -32.237 -8.783 1.0	0.00
ATOM	217	CA	LYS	25	4.743 -33.677 -9.000 1.0	0.00
ATOM	218	CB	LYS	25	5.813 -34.257 -8.072 1.0	0.00
ATOM	219	CG	LYS	25	6.250 -35.693 -8.356 1.0	0.00
ATOM	220	CD	LYS	25	7.377 -36.128 -7.399 1.0	0.00
ATOM	221	CE	LYS	25	8.604 -35.196 -7.398 1.0	0.00
ATOM	222	NZ	LYS	25	8.475 -34.077 -6.439 1.0	0.00
ATOM	223	C	LYS	25	3.377 -34.358 -8.853 1.0	
ATOM	224	0	LYS	25	3.166 -35.384 -9.498 1.6	0.00
ATOM	225	N	TYR	26	2.465 -33.838 -8.018 1.0	00.00
ATOM	226	CA	TYR	26	1.158 -34.458 -7.775 1.0	00.00
ATOM	227	CB	TYR	26	1.175 -35.101 -6.383 1.0	00.00
ATOM	228	CG	TYR	26	2.379 -35.990 -6.135 1.0	00.00
ATOM	229		TYR	26	2.559 -37.158 -6.895 1.0	
ATOM	230		TYR	26	3.678 -37.976 -6.672 1.0	
ATOM	231	CZ	TYR	26	4.619 -37.631 -5.687 1.0	
ATOM	232	OH	TYR	26	5.703 -38.430 -5.472 1.0	
ATOM	233		2 TYR	26	4.443 -36.460 -4.930 1.	
ATOM	234	CD2	2 TYR	26	3.324 -35.642 -5.154 1.	00.00

3

```
847
                                                                    848
ATOM
        235 C
                  TYR
                         26
                                  -0.039 -33.509
                                                  -7.885 1.00 0.00
             0
                  TYR
                         26
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        236
                                  -1.165 -33.973
                                                  -8.053
             N
                  GLY
                         27
ATOM
        237
                                  0.186 - 32.198
                                                 -7.778
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  GLY
ATOM
        238
             CA
                         27
                                  -0.864 -31.188
                                                  -7.835
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  GLY
        239
             C
                         27
                                  -1.523 -31.013 -6.468
                                                           1.00
ATOM
                                                                 0.00
             0
                  GLY
ATOM
        240
                         27
                                  -1.329 -31.832
                                                  -5.567
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  GLU
             N
                         28
                                  -2.313 -29.945
                                                  -6.310
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        241
                  GLU
                                  -3.026 -29.655
             CA
                                                           1.00
ATOM
        242
                         28
                                                   -5.077
                                                                 0.00
             CB
                  GLU
                                                                 0.00
ATOM
        243
                         28
                                  -3.739 -28.298
                                                  -5.192
                                                          1.00
             CG
                 GLU
ATOM
        244
                         28
                                  -2.758 -27.114
                                                  -5.297
                                                           1.00
                                                                 0.00
             CD
                 GLU
ATOM
        245
                         28
                                  -2.352 -26.723
                                                  -6.717
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OE1 GLU
ATOM
        246
                                  -1.892 -25.567
                                                   -6.867
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         28
             OE2 GLU
ATOM
                         28
                                  -2.515 -27.556
                                                  -7.633
                                                           1.00
                                                                 0.00
        247
ATOM
        248
             C
                  GLU
                                  -4.007 -30.790
                                                  -4.750
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         28
             0
                  GLU
ATOM
        249
                          28
                                  -4.348 -31.596
                                                  -5.615
                                                           1.00
                                                                 0.00
             N
                  GLY
                                  -4.447 -30.865
ATOM
        250
                          29
                                                   -3.490
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             CA
                  GLY
                                                   -3.033
        251
                          29
                                  -5.356 -31.907
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C
                  GLY
                                                  -2.875
ATOM
        252
                          29
                                  -4.637 -33.246
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        253
             0
                  GLY
                          29
                                 -5.215 -34.303
                                                  -3.119
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             N
                  ASN
                                  -3.370 -33.185
                                                   -2.454
        254
                          30
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         255
              CA
                  ASN
                                                   -2.209
                                                                 0.00
                          30
                                  -2.497 -34.326
                                                           1.00
              CB
                  ASN
                                  -1.702 -34.658
                                                   -3.485
ATOM
        256
                          30
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         257
              CG
                  ASN
                          30
                                  -2.585 -35.134
                                                   -4.635
                                                          1.00
                                                                 0.00
              OD1 ASN
                                  -2.944 -36.308
ATOM
         258
                          30
                                                   -4.701
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              ND2 ASN
         259
                          30
                                  -2.920 -34.237
                                                   -5.559
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         260
             C
                  ASN
                                  -1.539 -33.956
                                                   -1.074
                          30
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         261
             0
                  ASN
                          30
                                  -0.407 -34.434
                                                   -1.038
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         262
              N
                  TRP
                          31
                                  -1.977 -33.086
                                                   -0.156
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CA
                  TRP
ATOM
         263
                          31
                                  -1.163 -32.595
                                                    0.947
                                                           1.00
                                                                 0.00
              CB
                  TRP
                                  -1.922 -31.535
ATOM
         264
                          31
                                                    1.752
                                                           1.00
                                                                  0.00
              CG
                  TRP
                                  -2.753 -30.612
ATOM
         265
                          31
                                                    0.915 1.00
                                                                  0.00
              CD1 TRP
ATOM
         266
                          31
                                  -4.103 -30.622
                                                    0.824 1.00
                                                                  0.00
ATOM
         267
              NE1 TRP
                          31
                                  -4.522 -29.645
                                                   -0.055
                                                           1.00
                                                                  0.00
              CE2 TRP
ATOM
         268
                          31
                                  -3.450 -28.951
                                                   -0.570
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         269
              CZ2 TRP
                          31
                                  -3.353 -27.892
                                                   -1.481
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         270
              CH2 TRP
                          31
                                  -2.085 -27.399
                                                   -1.814
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         271
              CZ3 TRP
                          31
                                  -0.932 -27.963
                                                   -1.244
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         272
              CE3 TRP
                          31
                                  -1.042 -29.028
                                                   -0.332
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
              CD2 TRP
                                  -2.303 -29.548
         273
                          31
                                                    0.029
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         274
             C
                  TRP
                                  -0.632 -33.751
                                                    1.791
                                                           1.00
                                                                  0.00
                          31
ATOM
         275
              0
                  TRP
                          31
                                   0.562 - 33.798
                                                    2.066
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  SER
ATOM
         276
              N
                          32
                                  -1.504 -34.689
                                                    2.170
                                                           1.00
                                                                  0.00
              CA
                  SER
                          32
ATOM
         277
                                  -1.160 -35.878
                                                    2.939
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
         278
              CB
                  SER
                          32
                                  -2.392 -36.790
                                                    3.022
                                                           1.00
                                                                  0.00
              0G
                  SER
                          32
         279
                                  -2.859 -37.150
                                                           1.00
                                                                  0.00
ATOM
                                                    1.728
ATOM
         280
              C
                  SER
                          32
                                   0.016 - 36.630
                                                    2.303
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  SER
ATOM
         281
              0
                          32
                                   0.998 -36.959
                                                    2.966
                                                                  0.00
                                                           1.00
 ATOM
         282
              N
                  LYS
                          33
                                  -0.094 -36.898
                                                    1.000
                                                           1.00
                                                                  0.00
                                   0.911 - 37.605
ATOM
         283
              CA
                  LYS
                          33
                                                    0.221 1.00
                                                                  0.00
              CB
                                   0.402 - 37.839
ATOM
         284
                  LYS
                          33
                                                  -1.210 1.00
                                                                 0.00
```

	849				(120)	850
ATOM	285	CG	LYS	33	-0.972 -38.528 -1.237 1.00	0.00
ATOM	286	CD	LYS	33		0.00
ATOM	287	CE	LYS	33		0.00
	288	NZ		33		0.00
ATOM		NZ C	LYS			
ATOM	289		LYS	33		0.00
ATOM	290	0	LYS	33		0.00
ATOM	291	N	ILE	34		0.00
ATOM	292	CA	ILE	34		0.00
ATOM	293	CB	ILE	34	•	0.00
ATOM	294		ILE	34	3.871 -32.168 -0.543 1.00	0.00
ATOM	295		ILE	34	2.373 -33.327 -2.161 1.00	0.00
ATOM	296	CD1		34	1.554 -32.129 -2.658 1.00	0.00
ATOM	297	C	ILE	34	3.963 -34.572 1.202 1.00	0.00
ATOM	298	0	ILE	34	5.189 -34.528 1.249 1.00	0.00
ATOM	299	N	LEU	35	3.203 -34.626 2.303 1.00	0.00
ATOM	300	CA	LEU	35	3.708 -34.654 3.673 1.00	0.00
ATOM	301	CB	LEU	35	2.520 -34.528 4.649 1.00	0.00
ATOM	302	CG	LEU	35	2.828 -34.058 6.082 1.00	0.00
ATOM	303		LEU	35	1.517 -34.080 6.880 1.00	0.00
ATOM	304		LEU	35	3.871 -34.907 6.816 1.00	0.00
ATOM	305	C	LEU	35	4.480 -35.959 3.890 1.00	0.00
ATOM	306	0	LEU	35	5.581 -35.951 4.436 1.00	0.00
ATOM	307	N	LEU	36	3.911 -37.092 3.457 1.00	0.00
ATOM	308	CA	LEU	36	4.550 -38.391 3.607 1.00	0.00
ATOM .	309	CB	LEU	36	3.606 -39.498 3.114 1.00	0.00
ATOM	310	CG	LEU	36	4.169 -40.921 3.274 1.00	0.00
ATOM	311	CD1	LEU	36	4.462 -41.272 4.737 1.00	0.00
ATOM	312	CD2	LEU	36	3.150 -41.919 2.710 1.00	0.00
ATOM	313	C	LEU	36	5.899 -38.401 2.883 1.00	0.00
ATOM	314	0	LEU	36	6.898 -38.850 3.444 1.00	0.00
ATOM	315	N	HIS	37	5.930 -37.895 1.645 1.00	0.00
ATOM	316	CA	HIS	37	7.144 -37.822 0.844 1.00	0.00
ATOM	317	CB	HIS	37	6.812 -37.335 -0.575 1.00	0.00
ATOM	318	CG	HIS	37	5.898 -38.246 -1.352 1.00	0.00
ATOM	319	ND1	HIS	37	6.216 -39.567 -1.632 1.00	0.00
ATOM	320	CE1	HIS	37	5.193 -40.083 -2.335 1.00	0.00
ATOM	321	NE2	HIS	37	4.213 -39.202 -2.547 1.00	0.00
ATOM	322	CD2	HIS	37	4.664 -38.045 -1.922 1.00	0.00
ATOM	323	C	HIS	37	8.168 -36.886 1.492 1.00	0.00
ATOM	324	0	HIS	37	9.309 -37.280 1.727 1.00	0.00
ATOM	325	N	TYR	38	7.757 -35.642 1.758 1.00	0.00
ATOM	326	CA	TYR	38	8.568 -34.586 2.333 1.00	0.00
ATOM	327	CB	TYR	38	8.482 -33.371 1.406 1.00	0.00
ATOM	328	CG	TYR	38	8.820 -33.694 -0.039 1.00	0.00
ATOM	329	CD1	TYR	38	7.834 -33.592 -1.038 1.00	0.00
ATOM	330	CE1	TYR	38	8.147 -33.892 -2.375 1.00	0.00
ATOM	331	CZ	TYR	38	9.448 -34.294 -2.716 1.00	0.00
ATOM	332	OH	TYR	38	9.751 -34.586 -4.016 1.00	0.00
ATOM	333	CEZ	2 TYR	38	10.436 -34.398 -1.723 1.00	0.00
ATOM	334	CD2	2 TYR	38	10.123 -34.098 -0.386 1.00	0.00

					(15.)			141/1120	, 0	
. =	851	_						852		
ATOM	335	C	TYR	38	8.075 -34.276	3.744				
ATOM	336	0	TYR	38	7.118 -33.528	3.928	1.00	0.00		
ATOM	337	N	LYS	39	8.736 -34.870	4.740	1.00	0.00		
ATOM	338	CA	LYS	39	8.413 -34.722	6.150	1.00	0.00		
ATOM	339	CB	LYS	39	9.156 -35.809	6.936	1.00	0.00		
ATOM	340	CG	LYS	39	8.642 -37.205	6.541	1.00	0.00		
ATOM	341	CD	LYS	39	9.319 -38.331	7.330	1.00	0.00		
ATOM	342	CE	LYS	39	10.810 -38.460	6.987	1.00	0.00		
ATOM	343	NZ	LYS	39	11.412 -39.652	7.611	1.00	0.00		
ATOM	344	C	LYS	39	8.743 -33.312	6.651	1.00	0.00		
ATOM	345	0	LYS	39	9.840 -33.061	7.147	1.00	0.00		
ATOM	346	N	PHE	40	7.776 -32.400	6.517	1.00	0.00		
ATOM	347	CA	PHE	. 40	7.872 -31.003	6.922	1.00	0.00		
ATOM	348	CB	PHE	40	6.652 -30.264	6.368	1.00	0.00		
ATOM	349	CG	PHE	40	6.417 -30.400	4.883	1.00	0.00		
ATOM	350	CD1	PHE	40	5.289 -31.076	4.393	1.00	0.00		
ATOM	351	CE1	PHE	40	5.082 -31.179	3.007	1.00	0.00		
ATOM	352	CZ	PHE	40	6.000 -30.603	2.111	1.00	0.00		
ATOM	353	CE2	PHE	40	7.131 -29.935	2.606	1.00	0.00		
ATOM	354	CD2	PHE	40	7.336 -29.835	3.990	1.00	0.00		
ATOM	355	C	PHE	40	7.894 -30.831	8.445	1.00	0.00		
ATOM	356	0	PHE	40	7.770 -31.802	9.192	1.00	0.00		
ATOM	357	N	ASN	41	8.022 -29.579	8.909	1.00	0.00		
ATOM	358	CA	ASN	41	8.021 -29.256	10.330	1.00	0.00		
ATOM	359	CB	ASN	41	8.645 -27.874	10.587	1.00	0.00		
ATOM	360	CG	ASN	41	10.156 -27.847	10.369	1.00	0.00		
ATOM	361	0D1	ASN	41	10.874 -28.688	10.902	1.00	0.00		
ATOM	362	ND2	ASN	. 41	10.660 - 26.873	9.613	1.00	0.00		
ATOM	363	C	ASN	41	6.583 -29.305	10.847	1.00	0.00		
ATOM	364	0	ASN	41	5.951 -28.267	11.026	1.00	0.00		
ATOM	365	N	ASN	42	6.081 -30.523	11.083	1.00	0.00		
ATOM	366	CA	ASN	42	4.741 -30.831	11.585	1.00	0.00		
ATOM	367	CB	ASN	42	4.675 -30.690	13.120	1.00	0.00		
ATOM	368	CG	ASN	42	4.901 -29.265	13.631	1.00	0.00		
ATOM	369	0 <b>D</b> 1	ASN	42	3.965 -28.480	13.745	1.00	0.00		
ATOM	370	ND2	ASN	42	6.149 -28.929	13.968	1.00	0.00		
ATOM	371	C	ASN	42	3.619 -30.083	10.851	1.00	0.00		
ATOM	372	0	ASN	42	2.615 -29.711	11.455	1.00	0.00		
ATOM	373	N	ARG	43	3.776 -29.877	9.539	1.00	0.00		
ATOM	374	CA	ARG	43	2.787 -29.186	8.726	1.00	0.00		
ATOM	375	CB	ARG	43	3.427 -28.582	7.470	1.00	0.00		
ATOM	376	CG	ARG	43	4.692 -27.776	7.753	1.00	0.00		
ATOM	377	CD	ARG	43	4.484 -26.573	8.672	1.00	0.00		
ATOM	378	NE	ARG	43	5.737 -25.821	8.713	1.00	0.00		
ATOM	379	CZ	ARG	43	5.984 -24.731	9.445	1.00	0.00		
ATOM	380		ARG	43	7.237 -24.275	9.512	1.00	0.00		
ATOM	381		ARG	43	5.006 -24.098	10.106	1.00	0.00		
ATOM	382	C	ARG	43	1.687 -30.164	8.325	1.00	0.00		
ATOM	383	0	ARG	43	1.919 -31.053	7.508	1.00	0.00		
ATOM	384	N	THR	44	0.491 -29.998	8.889	1.00	0.00		

					(420)				गामा ८ ८
	853								854
ATOM	385	CA	THR	44	-0.654	-30.839	8.577	1.00	0.00
ATOM	386	CB	THR	44	-1.766	-30.581	9.605	1.00	0.00
ATOM	387	CG2	THR	44	-1.281	-30.783	11.046	1.00	0.00
ATOM	388	0G1	THR	44	-2.258	-29.262	9.439	1.00	0.00
ATOM	389	C	THR	44	-1.175	-30.481	7.185	1.00	0.00
ATOM	390	0	THR	44	-0.749	-29.487	6.597	1.00	0.00
ATOM	391	N	SER	45	-2.135	-31.260	6.671	1.00	0.00
ATOM	392	CA	SER	45	-2.757	-30.961	5.390	1.00	0.00
ATOM	393	CB	SER	45	-3.813	-32.014	5.051	1.00	0.00
ATOM	394	0G	SER	45	-3.184	-33.255	4.812	1.00	0.00
ATOM	395	C	SER	45	-3.367	-29.556	5.430	1.00	0.00
ATOM	396	0	SER	45	-3.367	-28.861	4.418	1.00	0.00
ATOM	397	N	VAL	46	-3.861	-29.128	6.602	1.00	0.00
ATOM	398	CA	VAL	46		-27.804	6.804	1.00	0.00
ATOM	399	СВ	VAL	46		-27.679	8.214	1.00	0.00
ATOM	400		VAL	46		-26.275	8.440	1.00	0.00
ATOM	401		VAL	46		-28.691	8.459	1.00	0.00
ATOM	402	С	VAL	46		-26.751	6.587	1.00	0.00
ATOM	403	0	VAL	46		-25.823	5.803	1.00	0.00
ATOM	404	N	MET	47		-26.890	7.283	1.00	0.00
ATOM	405	CA	MET	47		-25.927	7.153	1.00	0.00
ATOM	406	CB	MET	47		-26.198	8.154	1.00	0.00
ATOM	407	CG	MET	47		-26.374	9.607	1.00	0.00
ATOM	408	SD	MET	47		-25.327	10.172	1.00	0.00
ATOM	409	CE	MET	47		-25.998	11.839	1.00	0.00
ATOM	410	C	MET	47		-25.881	5.716	1.00	0.00
ATOM	411	0	MET	47		-24.801	5.170	1.00	0.00
ATOM	412	N	LEU	48		-27.048	5.102	1.00	0.00
ATOM	413	CA	LEU	48		-27.178	3.733	1.00	0.00
ATOM	414	СВ	LEU	48		-28.667	3.388	1.00	0.00
ATOM	415	CG	LEU	48		-29.273	4.061	1.00	0.00
ATOM	416		LEU	48		-30.790	4.200	1.00	0.00
ATOM	417		LEU	48		-28.962	3.227	1.00	0.00
ATOM	418	C	LEU	48		-26.479	2.755	1.00	0.00
ATOM	419	0	LEU	48		-25.662	1.945	1.00	0.00
ATOM	420	N	LYS	49		-26.806	2.853	1.00	0.00
ATOM	421	CA	LYS	49		-26.234	2.038	1.00	0.00
ATOM	422	СВ	LYS	49		-26.761	2.562	1.00	0.00
ATOM	423	CG	LYS	49		-26.086	1.916	1.00	0.00
ATOM	424	CD	LYS	49		-26.299	2.704	1.00	0.00
ATOM	425	CE	LYS	49		-25.494	4.015	1.00	0.00
ATOM	426	NZ	LYS	49		-25.432	4.588	1.00	0.00
ATOM	427	С	LYS	49		-24.709	2.103	1.00	0.00
ATOM	428	0	LYS	49		-24.050	1.072	1.00	0.00
ATOM	429	N	ASP	50		-24.153	3.316	1.00	0.00
ATOM	430	CA	ASP	50		-22.717	3.539	1.00	0.00
ATOM	431	СВ	ASP	50		-22.421	5.034	1.00	0.00
ATOM	432	CG	ASP	50		-20.926	5.265	1.00	0.00
ATOM	433		ASP	50		-20.516	5.550	1.00	0.00
ATOM	434		ASP	50		-20.228	5.160	1.00	0.00

					(429)			特開2
	855							856
ATOM	435	C	ASP	50	-1.872 -22.088	2.958	1.00	0.00
ATOM	436	0	ASP	50	-1.966 -21.158	2.157	1.00	0.00
ATOM	437	N	ARG	51	-0.702 -22.597	3.365	1.00	0.00
ATOM	438	CA	ARG	51	0.592 -22.103	2.917	1.00	0.00
ATOM	439	CB	ARG	51	1.722 -23.040	3.384	1.00	0.00
ATOM	440	CG	ARG	51	3.107 -22.679	2.814	1.00	0.00
ATOM	441	CD	ARG	51	3.523 -21.257	3.202	1.00	0.00
ATOM	442	NE	ARG	51	4.881 -20.912	2.747	1.00	0.00
ATOM	443	CZ	ARG	51	5.291 -19.679	2.389	1.00	0.00
ATOM	444		ARG	51	6.568 -19.463	2.054	1.00	0.00
ATOM	445		ARG	51	4.444 -18.643	2.365	1.00	0.00
ATOM	446	С	ARG	51	0.600 -21.952	1.402	1.00	0.00
ATOM	447	0	ARG	51	0.891 -20.871	0.893	1.00	0.00
ATOM	448	N	TRP	52	0.279 -23.031	0.682	1.00	0.00
ATOM	449	CA	TRP	52	0.275 -23.005	-0.763	1.00	0.00
ATOM	450	CB	TRP	52	0.057 -24.404	-1.315	1.00	0.00
ATOM	451	CG	TRP	52	0.298 -24.483	-2.785	1.00	0.00
ATOM	452		TRP	52	-0.658 -24.599	-3.727	1.00	0.00
ATOM	453		TRP	52	-0.085 -24.651	-4.978	1.00	0.00
ATOM	454		TRP	52	1.292 -24.556	-4.899	1.00	0.00
ATOM	455		TRP	52	2.311 -24.556	-5.862	1.00	0.00
ATOM	456		TRP	52	3.646 -24.441	-5.446	1.00	0.00
			TRP					
ATOM	457			52 52	3.948 -24.324	-4.079	1.00	0.00
ATOM	458		TRP	52 52	2.920 -24.326	-3.120	1.00	0.00
ATOM	459		TRP	52 52	1.566 -24.444	-3.503	1.00	0.00
ATOM	460	C	TRP	52 52	-0.748 -22.021	-1.326	1.00	0.00
ATOM	461	0 N	TRP	52 53	-0.451 -21.344	-2.303	1.00	0.00
ATOM	462	N CA	ARG	53	-1.944 -21.926	-0.734	1.00	0.00
ATOM	463	CA	ARG	53	-2.965 -20.998	-1.210	1.00	0.00
ATOM	464	CB	ARG	53	-4.270 -21.173	-0.432	1.00	0.00
ATOM	465 466	CG CD	ARG	53 53	-4.928 -22.490 -5.905 -22.988	-0.859	1.00	0.00
ATOM ATOM			ARG			0.205	1.00	
	467	NE CZ	ARG		-7.186 -22.276 -8.242 -22.670			
ATOM	468	CZ	ARG ARG	53 53	-8.243 -22.670 -9.446 -22.118		1.00	
ATOM	469 470		ARG	53	-8.114 -23.637	-1.457	1.00	$0.00 \\ 0.00$
ATOM	470	C	ARG			-1.135		
ATOM	471				-2.444 -19.564 -2.561 -18.831		1.00	0.00
ATOM ATOM	472	O N	ARG THR		-1.856 -19.171	-2.114 0.001	1.00	$0.00 \\ 0.00$
ATOM	474	CA	THR		-1.288 -17.839	0.162	1.00	0.00
ATOM	475	CB	THR		-0.769 -17.657	1.596	1.00	
ATOM	476		THR		-0.292 -16.218	1.818	1.00	
ATOM	477		THR		-1.807 -17.946	2.510	1.00	0.00
ATOM	478	C	THR		-0.172 -17.651	-0.868	1.00	0.00
ATOM	479	0 N	THR		-0.155 -16.672	-1.610	1.00	
ATOM	480	N CA	MET		0.758 -18.608	-0.925	1.00	
ATOM	481	CA	MET		1.874 -18.607	-1.847	1.00	
ATOM	482	CB	MET		2.628 -19.932	-1.662 -2.240	1.00	
ATOM	483	CG	MET		4.029 -19.841	-2.240	1.00	
ATOM	484	SD	MET	55	5.164 -18.840	-1.251	1.00	0.00

```
857
                                                                  858
ATOM
        485 CE MET
                        55
                                  6.420 -18.626 -2.517
                                                         1.00 0.00
ATOM
        486
            С
                 MET
                        55
                                  1.409 -18.422 -3.299
                                                         1.00
                                                               0.00
        487 0
                 MET
ATOM
                        55
                                  2.059 -17.729
                                                -4.077
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        488 N
                 LYS
                         56
                                  0.290 - 19.051 - 3.664
                                                                0.00
                                                         1.00
ATOM
        489
             CA
                 LYS
                                 -0.295 -19.024
                                                 -4.994
                         56
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        490
            CB
                 LYS
                                 -1.178 - 20.273
                         56
                                                 -5.144
                                                         1.00
                                                                0.00
             CG
                 LYS
ATOM
        491
                         56
                                 -1.697 -20.512
                                                 -6.565
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        492
            CD
                 LYS
                                 -2.323 -21.913
                                                 -6.630
                         56
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
                 LYS
        493
             CE
                                 -2.769 -22.265
                                                 -8.053
                         56
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        494 NZ
                 LYS
                         56
                                 -3.290 - 23.644 - 8.134
                                                         1.00
                                                                0.00
            C
                 LYS
ATOM
        495
                                 -1.041 -17.715
                                                -5.258
                         56
                                                         1.00
                                                                0.00
             0
                 LYS
ATOM
        496
                         56
                                 -0.627 -16.936 -6.113
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
             N
                 LYS
        497
                                 -2.141 -17.472 -4.542
                                                         1.00
                                                                0.00
                         57
        498 CA
                 LYS
                                 -2.985 -16.292 -4.699
ATOM
                         57
                                                         1.00
                                                                0.00
                 LYS
ATOM
        499
             CB
                         57
                                 -4.419 -16.648 -4.267
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        500
             CG
                 LYS
                         57
                                 -5.096 -17.701 -5.158
                                                         1.00
                                                                0.00
             CD
                 LYS
ATOM
        501
                         57
                                 -5.449 -17.125
                                                 -6.537
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        502
             CE
                 LYS
                         57
                                 -6.335 -18.094
                                                 -7.329
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        503
             NZ
                 LYS
                                 -6.749 -17.518 -8.622
                         57
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        504
             C
                 LYS
                         57
                                 -2.463 -15.059
                                                 -3.947
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        505
             0
                 LYS
                                 -3.265 -14.264
                                                 -3.459
                         57
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        506
             N
                 LEU
                         58
                                 -1.141 -14.871
                                                 -3.861
                                                         1.00
                                                                0.00
        507
ATOM
             CA
                 LEU
                                 -0.566 -13.706
                                                 -3.197
                         58
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        508
             CB
                 LEU
                         58
                                 -0.782 -13.752
                                                 -1.667
                                                         1.00
                                                               0.00
                                                                0.00
ATOM
        509
             CG LEU
                                 -1.018 -12.366
                                                 -1.047
                         58
                                                          1.00
ATOM
             CD1, LEU
                                 -1.284 -12.531
                                                  0.453
                                                          1.00
                                                                0.00
        510
                         58
ATOM
             CD2 LEU
                                  0.173 - 11.421
                                                 -1.246
                                                          1.00
                                                                0.00
        511
                         58
ATOM
        512
             C
                 LEU
                         58
                                  0.908 - 13.553
                                                 -3.564
                                                         1.00
                                                                0.00
                 LEU
                         58
                                  1.280 -12.579
ATOM
        513
             0
                                                 -4.214
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             N
                 LYS
                                  1.754 -14.502
                                                                0.00
        514
                         59
                                                 -3.144
                                                          1.00
ATOM
             CA
                 LYS
                                  3.194 -14.432
                                                 -3.390
                                                          1.00
                                                                0.00
        515
                         59
ATOM
        516
             CB
                 LYS
                         59
                                  3.944 -15.200
                                                 -2.291
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        517
             CG
                 LYS
                         59
                                  5.338 - 14.606
                                                 -2.040
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        518
             CD
                 LYS
                         59
                                  5.838 - 14.963
                                                  -0.635
                                                          1.00
                                                                0.00
             CE
                 LYS
                                  7.117 -14.184
                                                 -0.294
                                                                0.00
ATOM
        519
                         59
                                                          1.00
ATOM
        520
             NZ
                 LYS
                         59
                                  7.367 -14.158
                                                   1.159
                                                          1.00
                                                                0.00
         521
             C
                  LYS
                         59
                                                 -4.808
                                                                0.00
ATOM
                                  3.606 -14.842
                                                         1.00
ATOM
         522
             0
                  LYS
                         59
                                  4.737 -14.577
                                                 -5.212
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
         523
             N
                  LEU
                         60
                                  2.701 -15.474
                                                 -5.564
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         524
             CA
                 LEU
                         60
                                  2.909 -15.917
                                                 -6.935
                                                          1.00
                                                                0.00
             CB LEU
ATOM
         525
                         60
                                  3.089 -14.714
                                                 -7.883
                                                         1.00
                                                                0.00
              CG LEU
ATOM
         526
                         60
                                  2.013 -13.624
                                                 -7.734
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             CD1 LEU
                                  2.368 -12.436
         527
                         60
                                                 -8.637
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
              CD2 LEU
                                  0.615 - 14.134
                                                 -8.095
         528
                         60
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         529
              C
                  LEU
                                  4.055 -16.925
                                                 -7.054
                                                                0.00
                         60
                                                          1.00
ATOM
         530
             0
                  LEU
                         60
                                  4.965 -16.720
                                                 -7.854
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         531
              N
                  ILE
                                  3.968 -18.007
                                                  -6.264
                                                          1.00
                                                                0.00
                         61
              CA
                  ILE
ATOM
         532
                                  4.869 -19.162
                                                  -6.155
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
              CB
                 ILE
         533
                         61
                                  4.227 -20.381
                                                  -6.848
                                                          1.00
                                                                0.00
             CG2 ILE
                                  5.180 -21.583 -6.955 1.00 0.00
ATOM
         534
                         61
```

```
860
       859
        535 CG1 ILE
                                  2.976 -20.845 -6.082 1.00 0.00
ATOM
                        61
             CD1 ILE
                        61
                                  1.949 -21.472 -7.028
                                                         1.00
                                                                0.00
        536
ATOM
            C
                 ILE
                        61
                                  6.312 -18.883
                                                 -6.586
                                                         1.00
                                                                0.00
        537
ATOM
        538
            0
                 ILE
                        61
                                  7.174 -18.667
                                                 -5.736
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        539 N
                 SER
                        62
                                  6.578 -18.898 -7.894 1.00
                                                                0.00
ATOM
                                  7.891 -18.650 -8.455
        540 CA
                 SER
                        62
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
             CB
                 SER
                         62
                                  8.670 -19.968 -8.563
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        541
                                  7.953 -20.911 -9.338
ATOM
             0G
                 SER
                         62
                                                         1.00
                                                                0.00
        542
        543 C
                 SER
                         62
                                  7.720 -17.962 -9.804
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        544 0
                 SER
                         62
                                  7.870 -18.599 -10.847
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
                 SER
                                  7.411 -16.660 -9.779
ATOM
        545 N
                         63
                                                         1.00
                                                                0.00
                 SER
ATOM
        546 CA
                         63
                                  7.241 -15.847 -10.975
                                                          1.00
                                                                0.00
             CB
                 SER
                                                                0.00
ATOM
        547
                         63
                                  6.382 -14.619 -10.636
                                                          1.00
ATOM
        548
             OG
                 SER
                         63
                                  6.009 -13.924 -11.808
                                                         1.00
                                                                0.00
             C
                  SER
                         63
                                  8.637 -15.489 -11.499
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        549
ATOM
        550
             0
                  SER
                         63
                                  9.068 -14.339 -11.437
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        551 N
                  ASP
                                  9.344 -16.512 -11.991
                                                          1.00
                                                                0.00
                         64
                 ASP
ATOM
        552 CA
                                 10.699 -16.431 -12.509
                                                          1.00
                                                                0.00
                         64
             CB
                 ASP
ATOM
        553
                         64
                                 11.282 -17.855 -12.493
                                                         1.00
                                                                0.00
             CG
                 ASP
ATOM
        554
                         64
                                 12.795 -17.921 -12.678
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             OD1 ASP
                                 13.440 -16.852 -12.609
                                                          1.00
                                                                0.00
        555
                         64
             OD2 ASP
                                 13.280 -19.059 -12.858
                                                          1.00
ATOM
        556
                         64
                                                                0.00
ATOM
        557
             C
                  ASP
                                 10.711 -15.808 -13.909
                                                          1.00
                                                                0.00
                         64
ATOM
        558
             0
                  ASP
                                  9.661 -15.668 -14.538
                                                          1.00
                                                                0.00
                         64
ATOM
        559
             N
                  SER
                         65
                                 11.895 -15.430 -14.396
                                                          1.00
                                                                0.00
             CA
                  SER
ATOM
        560
                         65
                                 12.086 -14.815 -15.702
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         561
             CB
                  SER
                         65
                                 11.539 -13.379 -15.692
                                                          1.00
                                                                0.00
             0G
                  SER
                         65
                                                                0.00
ATOM
         562
                                 12.155 -12.619 -14.671
                                                          1.00
ATOM
         563
             C
                  SER
                                 13.567 -14.835 -16.089
                                                          1.00
                                                                0.00
                         65
ATOM
         564
             0
                  SER
                         65
                                 14.433 -15.060 -15.246
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         565
             N
                  GLU
                         66
                                 13.847 -14.591 -17.375
                                                          1.00
                                                                0.00
             \mathsf{C}\mathsf{A}
                  GLU
ATOM
         566
                         66
                                 15.196 -14.563 -17.918
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
             CB
                  GLU
                                 15.143 -14.480 -19.453
                                                                0.00
         567
                         66
                                                          1.00
ATOM
         568
              CG
                  GLU
                         66
                                 14.248 -15.544 -20.108
                                                          1.00
                                                                0.00
              CD GLU
ATOM
         569
                         66
                                 14.666 -16.964 -19.746
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         570
              OE1 GLU
                                 13.861 -17.637 -19.066
                                                                0.00
                         66
                                                          1.00
ATOM
         571
             OE2 GLU
                         66
                                 15.776 -17.355 -20.168
                                                          1.00
                                                                0.00
             С
ATOM
         572
                  GLU
                         66
                                 15.986 -13.378 -17.351
                                                          1.00
                                                                0.00
             0
                  GLU
ATOM
         573
                         66
                                 17.137 -13.546 -16.952
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         574
              N
                  ASP
                         67
                                 15.341 -12.203 -17.336
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         575
              CA ASP
                         67
                                 15.844 -10.914 -16.873
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         576
              CB
                  ASP
                         67
                                  16.427 -10.985 -15.451
                                                          1.00
                                                                 0.00
              CG
                 ASP
ATOM
         577
                         67
                                 16.660 -9.598 -14.857
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
         578
              OD1 ASP
                         67
                                 17.810 -9.328 -14.446
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         579
              OD2 ASP
                         67
                                  15.672 -8.833 -14.787
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                  16.795 -10.306 -17.908
ATOM
         580
              C
                  ASP
                         67
                                                          1.00
                                                                0.00
 ATOM
              OT1 ASP
                                  17.988 -10.682 -17.883
                                                          1.00
                                                                 0.00
         581
                         67
              OT2 ASP
 ATOM
         582
                         67
                                  16.246 -9.770 -18.897
                                                          1.00
                                                                 0.00
 ATOM
              05' GUA
                         68
                                  -8.448 -38.579 11.381
                                                          1.00
                                                                 0.00
         583
              C5' GUA
                         68
                                  -7.106 -38.260 11.069 1.00
                                                                0.00
 ATOM
         584
```

					(432)		17 IHI & U
	861						862
ATOM	585	C4'	GUA	68	-6.710 -38.728	9.657 1.00	0.00
ATOM	586	04'	GUA	68	-7.858 -38.828	8.817 1.00	0.00
ATOM	587	C1'	GUA	68	-8.007 -37.707	7.956 1.00	0.00
ATOM	588	N9	GUA	68	-9.307 -37.022	8.179 1.00	0.00
ATOM	589	68	GUA	68	-9.783 -36.430	9.324 1.00	
ATOM	590	N7	GUA	68	-10.991 -35.955	9.224 1.00	
ATOM	591	C5	GUA	68	-11.345 -36.229	7.910 1.00	
ATOM	592	C6	GUA	68	-12.559 -35.952	7.213 1.00	
ATOM	593	06	GUA	68	-13.593 -35.463	7.660 1.00	
ATOM	594	N1	GUA	68	-12.491 -36.309	5.872 1.00	
ATOM	595	C2	GUA	68	-11.401 -36.906	5.275 1.00	
ATOM	596	N2	GUA	68	-11.473 -37.168	3.969 1.00	
ATOM	597	N3	GUA	68	-10.278 -37.216	5.940 1.00	
ATOM	598	C4	GUA	68	-10.309 -36.849	7.250 1.00	
ATOM	599	C3'	GUA	68	-5.812 -37.717	8.934 1.00	
ATOM	600	C2'	GUA	68	-6.832 -36.791		
ATOM	601	03'				8.277 1.00	
			GUA	68	-5.015 -38.412	7.984 1.00	
ATOM	602	P	THY	69 60	-3.843 -37.692	7.123 1.00	
ATOM	603		THY	69	-3.126 -36.747	8.008 1.00	
ATOM	604		THY	69	-3.091 -38.735	6.393 1.00	
ATOM	605	05'	THY	69	-4.671 -36.838	6.041 1.00	
ATOM	606	C5'	THY	69	-5.575 -37.469	5.157 1.00	
ATOM	607	C4'	THY	69	-6.603 -36.483	4.590 1.00	
ATOM	608	04'	THY	69	-7.524 -35.901	5.476 1.00	
ATOM	609	C1'	THY	69	-8.123 -34.827	4.787 1.00	
ATOM	610	N1	THY	69	-8.969 -34.038	5.718 1.00	
ATOM	611	C6	THY	69	-8.537 -33.778	6.998 1.00	
ATOM	612	C5	THY	69	-9.369 -33.238	7.923 1.00	
ATOM	613	C7	THY	69	-8.779 -32.989	9.299 1.00	
ATOM	614	C4	THY	69	-10.749 -32.924	7.611 1.00	
ATOM	615	04	THY	69	-11.584 -32.469	8.388 1.00	
ATOM	616	N3	THY	69	-11.096 -33.185	6.298 1.00	
ATOM	617	C2	THY	69	-10.270 -33.720	5.323 1.00	
ATOM	618	02	THY	69	-10.692 -33.891	4.183 1.00	
ATOM	619	C3'	THY	69	-5.979 -35.284	3.868 1.00	
ATOM	620	C2'	THY	69	-6.875 -34.113	4.286 1.00	
ATOM	621	03'	THY	69	-5.939 -35.510	2.470 1.00	
ATOM	622	P	THY	70	-5.104 -34.545	1.484 1.00	
ATOM	623		THY	70	-4.119 -33.816	2.308 1.00	
ATOM	624		THY	70	-4.603 -35.359	0.355 1.00	
ATOM	625	05'	THY	70	-6.194 -33.482	0.956 1.00	
ATOM	626	C5'	THY	70	-7.253 -33.854	0.092 1.00	
ATOM	627	C4'	THY	70	-8.390 -32.827	0.181 1.00	-
ATOM	628	04'	THY	70	-8.825 -32.712	1.520 1.00	
ATOM	629	C1'	THY	70	-9.590 -31.533	1.619 1.00	
ATOM	630	N1	THY	70	-9.733 -31.100	3.030 1.00	
ATOM	631	C6	THY	70	-8.628 -31.041	3.839 1.00	
ATOM	632	C5	THY	70	-8.726 -30.638	5.129 1.00	
ATOM	633	C7	THY	70	-7.429 -30.600	5.911 1.00	0.00
ATOM	634	C4	THY	70	-9.999 -30.263	5.712 1.00	0.00

	863								864
ATOM	635	04	THY	70	-10.172	-29.863	6.860	1.00	0.00
ATOM	636	N3	THY	70	-11.068		4.843	1.00	0.00
ATOM	637	C2	THY	70	-10.994		3.504	1.00	0.00
ATOM	638	02	THY	70	-11.993		2.794	1.00	0.00
ATOM	639	C3'	THY	70		-31.393	-0.192	1.00	0.00
ATOM	640	C2'	THY	70		-30.531	0.795	1.00	0.00
ATOM	641	03'	THY	70		-31.099	-1.544	1.00	0.00
ATOM	642	P	ADE	71		-29.654	-2.194	1.00	0.00
ATOM	643		ADE	71		-29.782	-3.665	1.00	0.00
ATOM	644		ADE	71		-29.110	-1.537	1.00	0.00
ATOM	645	05'	ADE	71		-28.756	-1.728	1.00	0.00
ATOM	646	C5'	ADE	71		-29.074	-2.074	1.00	0.00
ATOM	647	C4'	ADE	71		-28.124	-1.369	1.00	0.00
ATOM	648	04'	ADE	71		-28.407	0.028	1.00	0.00
ATOM	649	C1'	ADE	71		-27.185	0.745	1.00	0.00
ATOM	650	N9	ADE.	71		-27.329	2.177	1.00	0.00
ATOM	651	C8	ADE	71		-27.709	2.688	1.00	0.00
ATOM	652	N7	ADE	71		-27.645	3.982	1.00	0.00
ATOM	653	C5	ADE	71		-27.187	4.371	1.00	0.00
ATOM	654	C6	ADE	71		-26.882	5.632	1.00	0.00
ATOM	655	N6	ADE	71		-27.083	6.752	1.00	0.00
ATOM	656	N1	ADE	71	-12.984	-26.328	5.701	1.00	0.00
ATOM	657	C2	ADE	71		-26.126	4.568	1.00	0.00
ATOM	658	N3	ADE	71		-26.405	3.322	1.00	0.00
ATOM	659	C4	ADE	71		-26.947	3.283	1.00	0.00
ATOM	660	C3'	ADE	71	-11.086	-26.664	-1.449	1.00	0.00
ATOM	661	C2'	ADE	71	-10.516	-26.531	-0.035	1.00	0.00
ATOM	662	03'	ADE	71	-12.213	-25.840	-1.695	1.00	0.00
ATOM	663	P	GUA	72	-12.091	-24.292	-2.118	1.00	0.00
ATOM	664	0P1	GUA	72	-10.678	-23.869	-2.003	1.00	0.00
ATOM	665	0P2	GUA	72	-12.813	-24.089	-3.391	1.00	0.00
ATOM	666	05'	GUA	72	-12.894	-23.552	-0.948	1.00	0.00
ATOM	667	C5'	GUA	72	-14.302	-23:648	-0.863	1.00	0.00
ATOM	668	C4'	GUA	72	-14.791	-22.931	0.393	1.00	0.00
ATOM	669	04'	GUA	72	-14.179	-23.526	1.525	1.00	0.00
ATOM	670	C1'	GUA	72	-13.703	-22.520	2.390	1.00	0.00
ATOM	671	N9	GUA	72	-12.561	-23.037	3.176	1.00	0.00
ATOM	672	C8	GUA	72	-11.380	-23.565	2.718	1.00	0.00
ATOM	673	N7	GUA	72	-10.556	-23.937	3.660	1.00	0.00
ATOM	674	C5	GUA	72	-11.249	-23.643	4.831	1.00	0.00
ATOM	675	C6	GUA	72	-10.875	-23.835	6.196	1.00	0.00
ATOM	676	06	GUA	72	-9.806	-24.273	6.623	1.00	0.00
ATOM	677	N1	GUA	72	-11.886	-23.488	7.084	1.00	0.00
ATOM	678	C2	GUA	72	-13.113	-22.976	6.707	1.00	0.00
ATOM	679	N2	GUA	72	-13.963	-22.613	7.667	1.00	0.00
ATOM	680	N3	GUA	72	-13.453	-22.762	5.429	1.00	0.00
ATOM	681	C4	GUA	72		-23.120	4.544	1.00	0.00
ATOM	682	C3'		72		-21.443	0.416	1.00	0.00
ATOM	683			72		-21.424	1.427	1.00	0.00
ATOM	684	03'	GUA	72	-15.527	-20.683	0.820	1.00	0.00

					(434)				付用とし
	865								866
ATOM	685	P	GUA	73	-15.493	-19.071	0.913	1.00	0.00
ATOM	686	0P1	GUA	73	-14.288	-18.580	0.205	1.00	0.00
ATOM	687	0P2	GUA	73	-16.829	-18.555	0.544	1.00	0.00
ATOM	688	05'	GUA	73	-15.280	-18.850	2.491	1.00	0.00
ATOM	689	C5'	GUA	73	-16.303	-19.182	3.409	1.00	0.00
ATOM	690	C4'	GUA	73	-15.827	-18.981	4.847	1.00	0.00
ATOM	691	04'	GUA	73	-14.696	-19.797	5.106	1.00	0.00
ATOM	692	C1'	GUA	73	-13.806	-19.074	5.923	1.00	0.00
ATOM	693	N9	GUA	73	-12.440	-19.641	5.863	1.00	0.00
ATOM	694	C8	GUA	73	-11.653		4.763	1.00	0.00
ATOM	695	N7	GUA	73	-10.491		5.038	1.00	0.00
ATOM	696	C5	GUA	73	-10.504		6.424	1.00	0.00
ATOM	697	C6	GUA	73		-21.067	7.309	1.00	0.00
ATOM	698	06	GUA	73		-21.496	7.027	1.00	0.00
ATOM	699	N1	GUA	73		-21.109		1.00	0.00
ATOM	700	C2	GUA	73	-11.196		9.057	1.00	0.00
ATOM	701	N2	GUA	73		-20.740		1.00	0.00
ATOM	702	N3	GUA	73	-12.106		8.233	1.00	0.00
ATOM	703	C4	GUA	73	-11.704		6.934	1.00	0.00
ATOM	704	C3,	GUA	73	-15.396		5.158	1.00	0.00
ATOM	705	C2'	GUA	73	-13.880		5.282	1.00	0.00
ATOM	706	03'	GUA	73	-16.016		6.374	1.00	0.00
ATOM	707	P	GUA	74	-15.866		7.031	1.00	0.00
ATOM	708		GUA	74		-15.144	7.273	1.00	0.00
ATOM	709		GUA	74	-14.882		6.257	1.00	0.00
ATOM	710	05'	GUA	74		-16.062	8.451	1.00	0.00
ATOM	711	C5'	GUA	74		-16.839	9.397	1.00	0.00
ATOM	712	C4'	GUA	74		-17.121	10.637	1.00	0.00
ATOM	713	04'	GUA	74		-17.771	10.252	1.00	0.00
ATOM	714	C1'	GUA	74		-17.085	10.773	1.00	0.00
ATOM	715	N9	GUA	74		-17.192	9.819	1.00	0.00
ATOM	716	C8	GUA	74		-16.858	8.489	1.00	0.00
ATOM	717		GUA	74		-17.118	7.882		0.00
ATOM	718	C5	GUA	74		-17.671	8.882	1.00	
ATOM	719	C6	GUA	74		-18.182	8.816	1.00	0.00
ATOM	720	06	GUA	74	-7.618	-18.231	7.837	1.00	0.00
ATOM	721	N1	GUA	74		-18.673	10.036	1.00	0.00
ATOM	722	C2	GUA	74	-8.663	-18.684	11.192	1.00	0.00
ATOM	723	N2	GUA	74	-8.084	-19.137	12.305	1.00	0.00
ATOM	724	N3	GUA	74		-18.205	11.257	1.00	0.00
ATOM	725	C4	GUA	74		-17.717	10.072	1.00	0.00
ATOM	726	C3'	GUA	74	-14.652	-15.849	11.392	1.00	0.00
ATOM	727	C2'	GUA	74		-15.642	10.899	1.00	0.00
ATOM	728	03'	GUA	74		-16.105	12.784	1.00	0.00
ATOM	729	P	THY			-14.977	13.893	1.00	0.00
ATOM	730		THY	75		-15.255	15.083	1.00	
ATOM	731		? THY	75		-13.645	13.251	1.00	
ATOM	732	05'				-15.297	14.261	1.00	
ATOM	733	C5'				-16.479	14.958	1.00	
ATOM	734	C4'				-16.549	15.147	1.00	

```
867
                                                                   868
ATOM
        735
            04' THY
                         75
                                -10.384 -16.566
                                                 13.890
                                                          1.00 0.00
             C1'
                                 -9.129 -15.942
                                                  14.029
                                                           1.00
                                                                0.00
        736
                 THY
                         75
ATOM
             N1
                 THY
                         75
                                 -8.581 -15.580
                                                  12.692
                                                         1.00
                                                                 0.00
ATOM
        737
                 THY
                                 -9.370 -14.926
                                                  11.770
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        738
             C6
                         75
                 THY
                                                  10.509
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        739
            C5
                         75
                                 -8.928 -14.688
             C7
                  THY
                                 -9.880 -13.949
                                                   9.588
ATOM
        740
                         75
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  THY
                         75
                                 -7.616 -15.122
                                                  10.069
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        741
             C4
ATOM
                  THY
                         75
                                  -7.149 -14.992
                                                   8.941
                                                           1.00
        742
             04
                                                                 0.00
                  THY
                         75
                                                  11.055
ATOM
        743
             N3
                                 -6.880 -15.752
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C2
                  THY
                                                  12.356
ATOM
        744
                         75
                                  -7.291 -15.997
                                                          1.00
                                                                 0.00
             02
                 THY
                         75
                                  -6.532 -16.558
ATOM
        745
                                                  13.142
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C3'
                  THY
                                                  15.900
ATOM
        746
                         75
                                 -10.462 -15.334
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C2'
                 THY
ATOM
        747
                         75
                                  -9.509 -14.726
                                                  14.868
                                                          1.00
                                                                 0.00
             03'
                  THY
ATOM
        748
                         75
                                  -9.809 -15.790
                                                  17.073
                                                          1.00
                                                                 0.00
        749
             P
                  THY
                         76
                                  -9.145 -14.784
                                                  18.149
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
ATOM
        750
             OP1 THY
                         76
                                  -9.390 -15.323
                                                  19.505
                                                           1.00
                                                                 0.00
             OP2 THY
                                  -9.544 -13.397
                                                  17.823
                                                                 0.00
ATOM
        751
                         76
                                                          1.00
             05'
                 THY
ATOM
        752
                         76
                                  -7.577 -14.947
                                                  17.820
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         753
             C5' THY
                         76
                                  -6.910 -16.164
                                                  18.097
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         754
              C4'
                 THY
                                  -5.504 -16.151
                                                  17.497
                                                                 0.00
                         76
                                                          1.00
                  THY
ATOM
         755
             04'
                                  -5.591 -15.871
                                                  16.107
                                                          1.00
                                                                 0.00
                         76
ATOM
         756
             C1'
                  THY
                         76
                                  -4.513 -15.042 15.740
                                                          1.00
                                                                 0.00
              N1
                  THY
ATOM
         757
                         76
                                  -4.771 -14.353
                                                  14.442
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
         758
              C6
                         76
                                  -5.869 -13.537
                                                  14.277
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C5
                  THY
                                  -6.150 -12.962
                                                  13.080
         759
                         76
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         760
             C7
                  THY
                                  -7.382 -12.077
                                                  13.038
                         76
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         761
              C4
                  THY
                         76
                                  -5.316 -13.185
                                                  11.916
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         762
              04
                  THY
                         76
                                  -5.513 -12.744
                                                  10.785
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         763
              N3
                  THY
                                 -4.219 -13.987
                                                   12.169
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         76
ATOM
         764
              C2
                  THY
                         76
                                  -3.905 -14.597
                                                   13.373
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         765
              02
                  THY
                         76
                                  -2.903 -15.306
                                                   13.456
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         766
              C3,
                 THY
                         76
                                  -4.574 -15.082
                                                   18.105
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C2'
                  THY
                                  -4.459 -14.097
                                                   16.935
                                                                 0.00
         767
                         76
                                                           1.00
              03'
                  THY
ATOM
         768
                         76
                                  -3.358 -15.712
                                                   18.502
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         769
              P
                  ADE
                         77
                                  -2.009 -14.895
                                                   18.852
                                                           1.00
                                                                 0.00
              OP1 ADE
ATOM
         770
                         77
                                  -1.146 -15.687
                                                   19.765
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         771
              OP2 ADE
                         77
                                  -2.347 -13.497
                                                   19.193
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         772
              05'
                  ADE
                                  -1.309 -14.916
                                                   17.408
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         77
              C5'
                  ADE
ATOM
         773
                         77
                                  -0.809 -16.122
                                                   16.863
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         774
              C4'
                  ADE
                                                   16.201
                         77
                                   0.548 - 15.888
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         775
              04'
                  ADE
                                   0.353 -15.285
                                                   14.942
                                                                 0.00
                         77
                                                           1.00
ATOM
         776
              C1'
                  ADE
                         77
                                   0.838 - 13.959
                                                   14.919
                                                           1.00
                                                                 0.00
              N9
ATOM
         777
                  ADE
                         77
                                  -0.202 -13.112
                                                   14.293
                                                           1.00
                                                                  0.00
                  ADE
ATOM
         778
              63
                         77
                                  -1.386 -12.652
                                                   14.819
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  ADE
ATOM
         779
              N7
                          77
                                  -2.171 -12.068
                                                   13.957
                                                           1.00
                                                                  0.00
              C5
                  ADE
                                  -1.453 -12.141
                                                   12.772
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         780
                          77
              C6
                  ADE
ATOM
         781
                         77
                                  -1.726 -11.714
                                                   11.459
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         782
              N6
                  ADE
                         77
                                  -2.867 -11.113
                                                   11.122
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  ADE
ATOM
         783
              N1
                          77
                                  -0.794 -11.914
                                                   10.512
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C2
                  ADE
                                   0.337 -12.529
                                                   10.841 1.00 0.00
         784
```

					(430)	•			171H1 4 0
	869								870
ATOM	785	N3	ADE	77	0.697	-13.020	12.022	1.00	0.00
ATOM	786	C4	ADE	77	-0.249	-12.769	12.966	1.00	0.00
ATOM	787	C3'	ADE	77	1.457	-14.944	16.998	1.00	0.00
ATOM	788	C2'	ADE	77	1.151	-13.586	16.370	1.00	0.00
ATOM	789	03'	ADE	77	2.809	-15.346	16.863	1.00	0.00
ATOM	790	P	GUA	78	3.978	-14.722	17.787	1.00	0.00
ATOM	791	0P1	GUA	78	3.370	-14.399	19.101	1.00	0.00
ATOM	792	0P2	GUA	78	5.132	-15.645	17.739	1.00	0.00
ATOM	793	05'	GUA	78	4.370	-13.379	16.989	1.00	0.00
ATOM	794	C5'	GUA	78	5.159	-13.472	15.814	1.00	0.00
ATOM	795	C4'	GUA	78	4.964	-12.291	14.860	1.00	0.00
ATOM	796	04'	GUA	78	3.605	-12.028	14.576	1.00	0.00
ATOM	797	C1'	GUA	78		-10.747	13.991	1.00	0.00
ATOM	798	N9	GUA	78		-10.221	13.925	1.00	0.00
ATOM	799	C8	GUA	78		-10.113	14.937	1.00	0.00
ATOM	800		GUA	78	0.114	-9.617	14.565	1.00	0.00
ATOM	801	C5	GUA	78	0.281	-9.370	13.206	1.00	0.00
ATOM	802	C6	GUA	78	-0.633	-8.837	12.246	1.00	0.00
ATOM	803	06	GUA	78	-1.792	-8.464	12.415	1.00	0.00
ATOM	804	N1	GUA	78	-0.086	-8.777	10.969	1.00	0.00
ATOM	805	C2	GUA	78	1.191	-9.187	10.647	1.00	0.00
ATOM		· N2	GUA	78	1.569	-9.087	9.373	1.00	0.00
ATOM	807	N3	GUA	78	2.051	-9.685	11.545	1.00	0.00
ATOM	808	C4	GUA	78	1.540	-9.748	12.804	1.00	0.00
ATOM	809	C3,	GUA	78		-10.957	15.348	1.00	0.00
ATOM	810	C2'	GUA	78	4.439	-9.959	14.964	1.00	0.00
ATOM	811	03'	GUA	78		-10.763	14.677	1.00	0.00
ATOM	812	P	GUA	79	7.666		14.822	1.00	0.00
ATOM	813		GUA	79	7.299		16.082	1.00	0.00
ATOM	814		GUA	79	9.078		14.558	1.00	0.00
ATOM	815	05'	GUA	79	7.128		13.582	1.00	0.00
ATOM	816	C5'	GUA	79	7.327		12.249	1.00	0.00
ATOM	817	C4'	GUA	79	6.543		11.262	1.00	0.00
ATOM	818	04'	GUA	79	5.167		11.606	1.00	0.00
ATOM	819	C1'	GUA	79	4.646		11.335	1.00	0.00
ATOM	820	N9	GUA	79	3.387		12.079	1.00	0.00
ATOM	821	C8	GUA	79	3.149		13.423	1.00	0.00
ATOM	822	N7	GUA	79	1.922		13.779	1.00	0.00
ATOM	823	C5	GUA	79	1.300		12.587	1.00	0.00
ATOM	824	C6	GUA	79	-0.044		12.334	1.00	0.00
ATOM	825	06	GUA	79	-0.968		13.135	1.00	
ATOM	826	N1	GUA	79	-0.267		10.993	1.00	
ATOM	827	C2	GUA	79	0.686		10.003	1.00	
ATOM	828	N2	GUA	79	0.348		8.780	1.00	
ATOM	829	N3	GUA	79	1.945		10.234	1.00	
ATOM	830	C4	GUA	79	2.190		11.541	1.00	
ATOM	831	C3'	GUA	79	6.988		11.232	1.00	
ATOM	832	C2'	GUA	79	5.775		11.840	1.00	
ATOM	833	03'	GUA	79	7.230		9.881	1.00	
ATOM	834	P	GUA	80	7.710		9.439	1.00	
		-				- · · · <b></b>			

					(437)				特開20
	871								872
ATOM	835	0P1	GUA	80	8.151	-4.050	10.641	1.00	0.00
ATOM	836	0P2	GUA	80	8.621	-4.925	8.281	1.00	0.00
ATOM	837	05'	GUA	80	6.334	-4.132	8.918	1.00	0.00
ATOM	838	C5'	GUA	80	5.704	-4.602	7.740	1.00	0.00
ATOM	839	C4'	GUA	80	4.453	-3.776	7.427	1.00	0.00
ATOM	840	04'	GUA	80	3.522	-3.899	8.488	1.00	0.00
ATOM	841	C1'	GUA	80	2.977	-2.631	8.785	1.00	0.00
ATOM	842	N9	GUA	80	2.452	-2.608	10.168	1.00	0.00
ATOM	843	C8	GUA	80	3.107	-2.917	11.333	1.00	0.00
ATOM	844	N7	GUA	80	2.344	-2.912	12.391	1.00	0.00
ATOM	845	C5	GUA	80	1.090	-2.573	11.897	1.00	0.00
ATOM	846	C6	GUA	80	-0.167	-2.475	12.566	1.00	0.00
ATOM	847	06	GUA	80	-0.413	-2.661	13.756	1.00	0.00
ATOM	848	N1	GUA-	80	-1.205	-2.153	11.700	1.00	0.00
ATOM	849	C2	GUA		-1.060	-1.939	10.346	1.00	0.00
ATOM	850	N2	GUA	80	-2.151	-1.607	9.652	1.00	0.00
ATOM	851	N3	GUA	8Ö	0.116	-2.041	9.711	1.00	0.00
ATOM	852	C4	GUA	80	1.148	-2.368	10.537	1.00	0.00
ATOM	853	C3'	GUA	80	4.743	-2.272	7.298	1.00	0.00
ATOM	854	C2'	GUA	80	4.185	-1.716	8.604	1.00	0.00
ATOM	855	03'	GUA	80	4.031	-1.723	6.209	1.00	0.00
ATOM	856	05'	CYT	81	-10.459	-1.596	14.332	1.00	0.00
ATOM	857	C5'	CYT	81	-10.356	-0.551	13.386	1.00	0.00
ATOM	858	C4'	CYT	81	-9.203	-0.811	12.410	1.00	0.00
ATOM	859	04'	CYT	81	-7.980	-0.965	13.096	1.00	0.00
ATOM	860	C1'	CYT	81	-7.090	-1.623	12.222	1.00	
ATOM	861	N1	CYT	81	-5.946	-2.217	12.955	1.00	0.00
ATOM	862	C6	CYT	81	-6.164	-2.896	14.127	1.00	0.00
ATOM	863	C5	CYT	81	-5.159	-3.517	14.782	1.00	
ATOM	864	C4	CYT	81	-3.847	-3.420	14.206	1.00	0.00
ATOM	865	N4	CYT	81	-2.801	-3.996	14.801	1.00	
ATOM	866	N3	CYT	81	-3.647	-2.775	13.051	1.00	
ATOM	867	C2	CYT	81	-4.674		12.385		
ATOM	868	02	CYT	81	-4.463	-1.631	11.306	1.00	
ATOM	869	C3'		81	-9.365	-2.104	11.595	1.00	
ATOM	870	C2'		81	-7.969	-2.724	11.649	1.00	
ATOM	871	03'	CYT	81	-9.787	-1.781	10.278	1.00	
ATOM	872	P	CYT	82	-10.034	-2.901	9.137	1.00	
ATOM	873		CYT	82	-10.288	-4.195	9.808	1.00	
ATOM	874		CYT	82	-11.022	-2.363	8.177	1.00	
ATOM	875	05'		82	-8.604	-2.999	8.388	1.00	
ATOM	876	C5'		82	-8.095	-1.924	7.620	1.00	
ATOM	877	C4'		82	-6.710	-2.260	7.047	1.00	
ATOM	878	04'		82 82	-5.806	-2.539	8.097	1.00	
ATOM	879	C1'		82 82	-4.984	-3.640	7.764	1.00	
ATOM	880	N1	CYT	82 82	-4.648	-4.343	9.024	1.00	
ATOM	881	C6	CYT	82	-5.663	-4.696	9.870	1.00	
ATOM	882	C5	CYT	82	-5.435	-5.281	11.059	1.00	
ATOM	883	C4	CYT	82	-4.063	-5.517	11.409	1.00	
ATOM	884	N4	CYT	82	-3.757	-6.129	12.553	1.00	
N I OIII	004	117	011	OL.	5.131	0.123	12.000	1.00	0.00

	070				(100)				י בי ותוניו
	873			••					874
ATOM	885	N3	CYT	82	-3.071	-5.192	10.568	1.00	0.00
ATOM	886	C2	CYT	82	-3.325	-4.620	9.356	1.00	0.00
ATOM	887	02	CYT	82	-2.399	-4.385	8.583	1.00	0.00
ATOM	888	C3 <b>'</b>	CYT	82	-6.711	-3.492	6.129	1.00	0.00
ATOM	889	C2'	CYT	82	-5.890	-4.515	6.901	1.00	0.00
ATOM	890	03'	CYT	82	-6.128	-3.132	4.884	1.00	0.00
ATOM	891	P	CYT	83	-6.101	-4.126	3.609	1.00	0.00
ATOM	892	0P1	CYT	83	-7.189	-5.116	3.766	1.00	0.00
ATOM	893	0P2	CYT	83	-6.031	-3.296	2.385	1.00	0.00
ATOM	894	05'	CYT	83	-4.695	-4.898	3.773	1.00	0.00
ATOM	895	C5'	CYT	83	-3.471	-4.326	3.342	1.00	0.00
ATOM	896	C4'	CYT	83	-2.303	-5.226	3.764	1.00	0.00
ATOM	897	04'	CYT	83	-2.356	-5.407	5.163	1.00	0.00
ATOM	898	C1'	CYT	83	-1.633	-6.565	5.514	1.00	0.00
ATOM	899	N1	CYT	83	-2.229	-7.162	6.736	1.00	0.00
ATOM	900	C6	CYT	83	-3.590	-7.243	6.852	1.00	0.00
ATOM	901	C5	CYT	83	-4.184	-7.635	8.000	1.00	0.00
ATOM	902	C4	CYT	83	-3.314	-7.992	9.085	1.00	0.00
ATOM	903	N4	CYT	83	-3.824	-8.360	10.260	1.00	0.00
ATOM	904	N3	CYT	83	-1.982	-8.002	8.936	1.00	0.00
ATOM	905	C2	CYT		-1.405	-7.620		1.00	0.00
				83			7.760		
ATOM	906	02	CYT	83	-0.189	-7.708	7.611	1.00	0.00
ATOM	907	C3'	CYT	83	-2.383	-6.645	3.188	1.00	0.00
ATOM	908	C2'	CYT.	83	-1.824	-7.502	4.324	1.00	0.00
ATOM	909	03'	CYT	83	-1.633	-6.777	1.991	1.00	0.00
ATOM	910	P	THY	84	-1.587	-8.163	1.147	1.00	0.00
ATOM	911	0P1		84	-2.876	-8.866	1.331	1.00	0.00
ATOM	912	0P2		84	-1.108	-7.854	-0.219	1.00	0.00
ATOM	913	05'	THY	84	-0.447	-9.035	1.885	1.00	0.00
ATOM	914	C5'	THY	84	0.910	-8.634	1.870	1.00	0.00
ATOM	915	C4'	THY	84	1.742	-9.502	2.822	1.00	0.00
ATOM	916	04'	THY	84	1.143	-9.491	4.108	1.00	0.00
ATOM	917	C1'	THY	84	1.048	-10.805	4.614	1.00	0.00
ATOM	918	N1	THY	84		-10.899	5.561	1.00	0.00
ATOM	919	C6	THY	84		-10.723	5.119	1.00	0.00
ATOM	920	C5	THY	84	-2.443	-10.745	5.980	1.00	0.00
ATOM	921	С7	THY	84	-3.834	-10.613	5.385	1.00	0.00
ATOM	922	C4	THY	84	-2.247	-10.919	7.402	1.00	0.00
ATOM	923	04	THY	84	-3.130	-10.903	8.253	1.00	0.00
ATOM	924	N3	THY	84	-0.926	-11.108	7.768	1.00	0.00
ATOM	925	C2	THY	84	0.165	-11.119	6.915	1.00	0.00
ATOM	926	02	THY	84	1.292	-11.317	7.363	1.00	0.00
ATOM	927	C3'	THY	84	1.850	-10.976	2.400	1.00	0.00
ATOM	928	C2'	THY	84	0.866	-11.650	3.355	1.00	0.00
ATOM	929	03'	THY	84	3.195	-11.395	2.575	1.00	0.00
ATOM	930	P	ADE	85	3.721	-12.849	2.111	1.00	0.00
ATOM	931	0P1	ADE	85	5.203	-12.830	2.078	1.00	0.00
ATOM	932	0P2	ADE	85	2.977	-13.276	0.906	1.00	0.00
ATOM	933	05'	ADE	85	3.277	-13.783	3.336	1.00	0.00
ATOM	934	C5'	ADE	85	3.928	-13.701	4.588	1.00	0.00

	875							876	
ATOM	935	C4'	ADE	85	3.172 -14.5	15 5.640	1.00	0.00	
ATOM	936	04'	ADE	85	1.904 -13.97	70 5.933	1.00	0.00	
ATOM	937	C1'	ADE	85	1.199 -14.96	6.636	1.00	0.00	
ATOM	938	N9	ADE	85	-0.239 -14.6	49 6.699	1.00	0.00	
ATOM	939	С8	ADE	85	-1.057 -14.2	43 5.676	1.00	0.00	
ATOM	940	N7	ADE	85	-2.271 -13.9	48 6.049	1.00	0.00	
ATOM	941	C5	ADE	85	-2.259 -14.18	88 7.420	1.00	0.00	
ATOM	942	C6	ADE	85	-3.226 -14.03	33 8.432	1.00	0.00	
ATOM	943	N6	ADE	85	-4.460 -13.5		1.00	0.00	
ATOM	944	N1	ADE	85	-2.882 -14.3		1.00	0.00	
ATOM	945	C2	ADE	85	-1.664 -14.8		1.00	0.00	
ATOM	946	N3	ADE	85	-0.661 -15.0		1.00	0.00	
ATOM	947	C4	ADE	85	-1.029 -14.6		1.00	0.00	
ATOM	948	C3'	ADE	85	2.873 -15.9		1.00	0.00	
ATOM	949	C2'	ADE	85	1.460 -16.1		1.00	0.00	•
ATOM	950	03'	ADE	85	3.871 -16.8		1.00	0.00	
ATOM	951	P	ADE	86	3.791 -18.4		1.00	0.00	
ATOM	952		ADE	86	5.166 -18.9		1.00	0.00	
ATOM	953	0P2	ADE	86	2.882 -18.7		1.00	0.00	
ATOM	954	05'	ADE	86	3.063 -18.8		1.00	0.00	
ATOM	955	C5'	ADE	86	3.580 -18.4		1.00	0.00	
ATOM	956	C4'	ADE	86	2.547 -18.7		1.00	0.00	
ATOM	957	04'	ADE	86	1.328 -18.0	79 9.032	1.00	0.00	
ATOM	958	C1'	ADE	86	0.247 -18.8	99 9.420	1.00	0.00	
ATOM	959	N9	ADE	86	-0.979 -18.4	33 8.727	1.00	0.00	•
ATOM	960	68	ADE	. 86	-1.163 -18.2	25 7.382	1.00	0.00	
ATOM	961	N7	ADE	86	-2.318 -17.7	10 7.066	1.00	0.00	
ATOM	962	C5	ADE	86	-2.962 -17.5	81 8.287	1.00	0.00	
ATOM	963	C6	ADE	86	-4.235 -17.0	98 8.650	1.00	0.00	
ATOM	964	N6	ADE	86	-5.125 -16.6	68 7.755	1.00	0.00	
ATOM	965	N1	ADE	86 -	-4.548 -17.0	30 9.956	1.00	0.00	
ATOM	966	C2	ADE	86	-3.653 -17.4	27 10.852	1.00	0.00	
ATOM	967	N3	ADE	86	-2.430 -17.9	07 10.640	1.00	0.00	
ATOM	968	C4	ADE	86	-2.142 -17.9	81 9.311	1.00	0.00	
ATOM	969	C3'	ADE	86	2.217 -20.2	39 9.364	1.00	0.00	
ATOM	970	C2'	ADE	86	0.735 -20.2	72 8.968	1.00	0.00	
ATOM	971	03'	ADE	86	2.508 -20.6	69 10.681	1.00	0.00	
ATOM	972	P	CYT	87	2.418 -22.2	07 11.150	1.00	0.00	
ATOM	973	0P1	CYT	87	2.414 -23.0	85 9.953	1.00	0.00	
ATOM	974	0P2	CYT	87	3.448 -22.4	10 12.194	1.00	0.00	
ATOM	975	05'	CYT	87	0.961 -22.2	06 11.845	1.00	0.00	
ATOM	976		CYT	87	0.738 -21.4	52 13.030	1.00	0.00	
ATOM	977	C4'	CYT	87	-0.752 -21.2	80 13.347	1.00	0.00	
ATOM	978	04'	CYT	87	-1.445 -20.6		1.00	0.00	
ATOM	979	C1'	CYT	87	-2.807 -21.0		1.00	0.00	
ATOM	980	N1	CYT	87	-3.522 -20.8		1.00	0.00	
ATOM	981	C6	CYT	87	-2.918 -21.2		1.00	0.00	
ATOM	982	C5	CYT	87	-3.514 -21.0		1.00	0.00	
ATOM	983	C4	CYT	87	-4.806 -20.4		1.00	0.00	
ATOM	984	N4	CYT	87	-5.420 -20.0	94 7.587	1.00	0.00	

					(440)			特用とひり
	877							878
ATOM	985	N3	CYT	87	-5.415 -20.108	9.881	1.00	0.00
ATOM	986	C2	CYT	87	-4.810 -20.343	11.078	1.00	0.00
ATOM	987	02	CYT	87	-5.399 -20.070	12.121	1.00	0.00
ATOM	988	C3'	CYT	87	-1.495 -22.589	13.663	1.00	0.00
ATOM	989	C2'	CYT	87	-2.694 -22.529	12.720	1.00	0.00
ATOM	990	03'	CYT	87	-1.874 -22.582	15.030	1.00	0.00
ATOM	991	P	CYT	88	-2.607 -23.837	15.743	1.00	0.00
ATOM	992	0P1	CYT	88	-2.348 -23.748	17.196	1.00	0.00
ATOM	993	0P2	CYT	88	-2.247 -25.069	15.005	1.00	0.00
ATOM	994	05'	CYT	88	-4.175 -23.547	15.491	1.00	0.00
ATOM	995	C5'	CYT	. 88	-4.859 -22.520	16.189	1.00	0.00
ATOM	996	C4'	CYT	88	-6.285 -22.366	15.650	1.00	0.00
ATOM	997	04'	CYT	88	-6.249 -22.084	14.267	1.00	0.00
ATOM	998	C1'	CYT	88	-7.437 -22.553	13.668	1.00	0.00
ATOM	999	N1	CYT	88	-7.189 -22.784	12.224	1.00	0.00
ATOM	1000	C6	CYT	88	-6.047 -23.432	11.841	1.00	0.00
ATOM	1001	C5	CYT	88	-5.717 -23.590	10.544	1.00	0.00
ATOM	1002	C4	CYT	88	-6.633 -23.053	9.577	1.00	0.00
ATOM	1003	N4	CYT	88	-6.358 -23.123	8.274	1.00	0.00
ATOM	1004	N3	CYT	88	-7.784 -22.478	9.955	1.00	0.00
ATOM	1005	C2	CYT	88	-8.103 -22.340	11.273	1.00	0.00
ATOM	1006	02	CYT	88	-9.184 -21.852	11.590	1.00	0.00
ATOM	1007	C3'	CYT	88	-7.145 -23.634	15.793	1.00	0.00
MOTA	1008	C2'	CYT	88	-7.653 -23.884	14.375	1.00	0.00
ATOM	1009	03'	CYT	88	-8.184 -23.390	16.730	1.00	0.00
ATOM	1010	P	CYT	89	-9.310 -24.491	17.101	1.00	0.00
ATOM	1011	0P1	CYT	89	-9.763 -24.240	18.486	1.00	0.00
ATOM	1012		CYT	89	-8.800 -25.828	16.725	1.00	0.00
ATOM	1013	05'	CYT	89	-10.521 -24.119	16.100	1.00	0.00
ATOM	1014	C5'	CYT	89	-11.274 -22.929	16.258	1.00	0.00
ATOM	1015	C4'	CYT	89	-12.317 -22.805	15.141	1.00	0.00
ATOM	1016	04'	CYT	89	-11.666 -22.847	13.887	1.00	0.00
ATOM	1017			89	-12.482 -23.498		1.00	0.00
ATOM	1018	N1	CYT	89	-11.605 -24.118		1.00	
ATOM	1019	C6	CYT	89	-10.515 -24.842		1.00	
ATOM	1020	C5	CYT	89	-9.621 -25.338		1.00	
ATOM	1021	C4	CYT	89	-9.871 -25.078	10.051	1.00	
ATOM	1022	N4	CYT	89	-9.028 -25.523	9.120	1.00	
ATOM	1023	N3	CYT	89	-10.966 -24.415	9.651	1.00	
ATOM	1024	C2	CYT	89	-11.866 -23.936	10.558	1.00	
ATOM	1025	02	CYT	89	-12.888 -23.378	10.170	1.00	
ATOM	1026	C3'		89	-13.339 -23.954	15.139	1.00	
ATOM	1027	C2'		89	-13.174 -24.579	13.758	1.00	
ATOM	1028	03'		89	-14.643 -23.438	15.363	1.00	
ATOM	1029	P OD1	THY	90	-15.962 -24.376	15.419	1.00	
ATOM Atom	1030 1031		THY THY	90 90	-16.948 -23.733 -15.537 -25.770	16.315 15.673	1.00	
ATOM	1031			90	-16.531 -24.301	13.911	1.00	
ATOM	1032			90	-17.044 -23.094		1.00	
ATOM	1033			90	-17.399 -23.269		1.00	
A I UII	1004	04	1111	30	11.555 25.205	11.033	1.00	0.00

	070				(111)			000
A TOM	879	0.43	TTI ITI	00	10.050 00.70	0 11 001	1 00	880
ATOM	1035	04'	THY	90	-16.259 -23.73		1.00	0.00
ATOM	1036	C1'	THY	90	-16.640 -24.68		1.00	0.00
ATOM	1037	N1	THY	90	-15.469 -25.56		1.00	0.00
ATOM	1038	C6	THY	90	-14.874 -26.23		1.00	0.00
ATOM	1039	C5	THY	90	-13.720 -26.91		1.00	0.00
ATOM	1040	C7	THY	90	-13.183 -27.65	1 12.064	1.00	0.00
ATOM	1041	C4	THY	90	-13.048 -26.95	4 9.570	1.00	0.00
ATOM	1042	04	THY	90	-11.968 -27.49	7 9.358	1.00	0.00
ATOM	1043	N3	THY	90	-13.729 -26.30	1 8.550	1.00	0.00
ATOM	1044	C2	THY	90	-14.938 -25.63	2 8.687	1.00	0.00
ATOM	1045	02	THY	90	-15.495 -25.15	5 7.703	1.00	0.00
ATOM	1046	C3'	THY	90	-18.513 -24.30	1 11.649	1.00	0.00
ATOM	1047	C2'	THY	90	-17.781 -25.43	4 10.931	1.00	0.00
ATOM	1048	03'	THY	90	-19.522 -23.70	2 10.848	1.00	0.00
ATOM	1049	P	ADE	91	-20.932 -24.43	0 10.534	1.00	0.00
ATOM	1050	0P1	ADE	91	-21.895 -23.39	6 10.096	1.00	0.00
ATOM	1051	0P2	ADE	91	-21.269 -25.31		1.00	0.00
ATOM	1052	05'	ADE	91	-20.584 -25.36		1.00	0.00
ATOM	1053	C5'	ADE	91	-20.446 -24.81		1.00	0.00
ATOM	1054	C4'	ADE	91	-19.871 -25.84		1.00	0.00
ATOM	1055	04'	ADE	91	-18.566 -26.23		1.00	0.00
ATOM	1056	C1'	ADE	91	-18.282 -27.41		1.00	0.00
ATOM	1057	N9	ADE	91	-17.105 -28.08		1.00	0.00
ATOM	1058	C8	ADE	91	-16.856 -28.35		1.00	0.00
ATOM	1059	N7	ADE	91	-15.676 -28.86		1.00	0.00
ATOM	1060	C5	ADE	91	-15.119 -28.97		1.00	0.00
ATOM	1061	C6	ADE	91	-13.868 -29.41		1.00	0.00
ATOM	1062	N6	ADE	91	-12.889 -29.81		1.00	0.00
ATOM	1063	N1	ADE	91	-13.655 -29.44		1.00	0.00
ATOM	1064	C2	ADE	91	-14.623 -29.04		1.00	0.00
ATOM	1065	N3	ADE	91	-15.814 -28.55		1.00	0.00
ATOM	1066	C4	ADE	91	-16.004 -28.54		1.00	0.00
ATOM	1067	C3,	ADE	91	-20.655 -27.16		1.00	0.00
ATOM	1068	C2'	ADE	91	-19.549 -28.22		1.00	0.00
ATOM	1069	03'	ADE	91	-21.491 -27.12		1.00	0.00
ATOM	1003	03 P	ADE	92	-22.387 -28.37		1.00	0.00
ATOM	1070		ADE	92 92	-22.699 -29.22		1.00	0.00
	1071		ADE		-23.482 -27.85		1.00	
ATOM ATOM	1072		ADE	92 92				0.00
ATOM		C5'			-21.366 -29.18		1.00	0.00
ATOM	1074	C4'	ADE	92	-20.827 -28.58		1.00	0.00
	1075		ADE	92	-19.738 -29.47		1.00	0.00
ATOM	1076	04'	ADE	92	-18.696 -29.68		1.00	
ATOM	1077	C1'	ADE	92	-18.236 -31.01		1.00	0.00
ATOM	1078	N9	ADE	92	-17.541 -31.41		1.00	
ATOM	1079	C8	ADE	92	-18.016 -31.37		1.00	
ATOM	1080	N7	ADE	92	-17.151 -31.72		1.00	0.00
ATOM	1081	C5	ADE	92	-16.017 -32.03		1.00	0.00
ATOM	1082	C6	ADE	92	-14.729 -32.46		1.00	
ATOM	1083	N6	ADE	92	-14.370 -32.62		1.00	
ATOM	1084	N1	ADE	92	-13.825 -32.69	99 5.490	1.00	0.00

					(443)					003-1	3 :
	883								884		
ATOM	7	0E2		1		-21.514	9.404	1.00	0.00		
ATOM	8	C	GLU	1		-19.787	13.979	1.00	0.00		
ATOM	9	0	GLU	1		-20.106	14.781	1.00	0.00		
ATOM	10	N	LYS	2		-19.975	14.198	1.00	0.00		
ATOM	11	CA	LYS	2		-20.578	15.395	1.00	0.00		
ATOM	12		LYS	2		-22.105	15.418	1.00	0.00		
ATOM	13	CG	LYS	2		-22.905	14.333	1.00	0.00		
ATOM	14	CD	LYS	2	18.114	-22.788	12.930	1.00	0.00		
ATOM	15	CE	LYS	2	17.468	-23.767	11.941	1.00	0.00		
ATOM	16	NZ	LYS	2	18.131	-23.730	10.619	1.00	0.00		
ATOM	17	C	LYS	2	18.531	-19.881	16.665	1.00	0.00		
ATOM	18	0	LYS	2	18.914	-20.536	17.632	1.00	0.00		
ATOM	19	N	HIS	3	18.527	-18.543	16.649	1.00	0.00		
ATOM	20	CA	HIS	3	18.965	-17.695	17.746	1.00	0.00		
ATOM	21	CB	HIS	3	20.149	-16.837	17.278	1.00	0.00		
ATOM	22	CG	HIS	3	20.665	-15.904	18.345	1.00	0.00		
ATOM	23	ND1	HIS	3	20.016	-14.723	18.674	1.00	0.00		
ATOM	24	CE1	HIS	3	20.725	-14.135	19.650	1.00	0.00		
ATOM	25	NE2	HIS	3	21.805	-14.838	19.999	1.00	0.00		
ATOM	26		HIS	3		-15.956	19.171	1.00	0.00		
ATOM	27	С	HIS	3	17.772	-16.850	18.188	1.00	0.00		
ATOM	28	0	HIS	3		-15.785	17.622	1.00	0.00		
ATOM	29	N	ARG	4		-17.335	19.195	1.00	0.00		
ATOM	30	CA	ARG	4		-16.685	19.748	1.00	0.00		
ATOM	31	CB	ARG	4		-15.421	20.537	1.00	0.00		
ATOM	32	CG	ARG	4		-14.709	21.239	1.00	0.00		
ATOM	33	CD	ARG	4		-15.608	22.231	1.00	0.00		
ATOM	34	NE	ARG	4		-14.869	22.933	1.00	0.00		
ATOM	35	CZ	ARG	4		-14.060	23.993	1.00	0.00		
ATOM	36		ARG	4		-13.835	24.489	1.00	0.00		
ATOM	37		ARG	4		-13.473		1.00	0.00		
ATOM	38	С	ARG	4		-16.431	18.632	1.00			
ATOM		0		4		-15.295					
ATOM	40	N	ALA	5		-17.513		1.00			
ATOM	41	CA	ALA	5		-17.471	17.082	1.00	0.00		
ATOM	42	СВ	ALA	5		-18.861	16.436	1.00	0.00		
ATOM	43	С	ALA	5		-16.958	17.630	1.00	0.00		
ATOM	44	0	ALA	5		-16.024	18.432	1.00	0.00		
ATOM	45	N	ARG	6		-17.550	17.205	1.00	0.00		
ATOM	46	CA	ARG	6		-17.187	17.626	1.00	0.00		
ATOM	47	СВ	ARG	6		-16.226	16.589	1.00	0.00		
ATOM	48	CG	ARG	6		-14.882	17.188	1.00	0.00		
ATOM	49	CD	ARG	6		-13.707	16.775	1.00	0.00		
ATOM	. 50	NE	ARG	6		-13.890	17.202	1.00	0.00		
ATOM	51	CZ	ARG	6		-13.082	16.879	1.00	0.00		
ATOM	52		ARG	6		-11.986	16.136	1.00	0.00		
ATOM	53		ARG	6		-13.383	17.301	1.00			
ATOM	54	С	ARG	6		-18.478	17.778	1.00			
ATOM	55	0	ARG	6		-19.564	17.501	1.00			
ATOM	56	N	LYS	7		-18.366	18.212	1.00	0.00		

``

	885							886	
ATOM	57	CA	LYS	7	6.450 -19.511	18.375	1.00	0.00	
ATOM	58		LYS	7	5.197 -19.093	19.168	1.00	0.00	
ATOM	59	CG	LYS	7	4.000 -20.048	19.064	1.00	0.00	
ATOM	60	CD	LYS	7	4.298 -21.459	19.583	1.00	0.00	
ATOM	61		LYS	7	3.043 -22.329	19.440	1.00	0.00	
ATOM	62	NZ	LYS	7	3.278 -23.713	19.890	1.00	0.00	
ATOM	63	C	LYS	7	6.123 -20.067	16.989			
				7			1.00	0.00	
ATOM	64	0	LYS		6.281 -21.263	16.746	1.00	0.00	
ATOM	65 cc	N	ARG	8	5.677 -19.197	16.080	1.00	0.00	
ATOM	66	CA	ARG	8	5.348 -19.573	14.719	1.00	0.00	
ATOM	67	CB	ARG	8	4.348 -18.586	14.112	1.00	0.00	
ATOM	68	CG	ARG	8	2.974 -18.705	14.776	1.00	0.00	
ATOM	69	CD	ARG	8	1.958 -17.906	13.956	1.00	0.00	
ATOM	70	NE	ARG	8	0.593 -18.092	14.458	1.00	0.00	
ATOM	71	CZ	ARG	8	-0.477 -17.422	13.998	1.00	0.00	
ATOM	72		ARG	8	-0.345 -16.541	13.003	1.00	0.00	
ATOM	73		ARG	8	-1.681 -17.609	14.550	1.00	0.00	
ATOM	74	C	ARG	8	6.623 -19.606	13.884	1.00	0.00	
ATOM	75	0	ARG	8	7.163 -18.559	13.528	1.00	0.00	
ATOM	76	N	GLN	9	7.092 -20.812	13.558	1.00	0.00	
ATOM	77	CA	GLN	9	8.272 -21.000	12.734	1.00	0.00	
ATOM	78	CB	GLN	9	8.822 -22.418	12.970	1.00	0.00	
ATOM	79	CG	GLN	9	10.287 -22.592	12.542	1.00	0.00	
ATOM	80	CD	GLN	9	10.500 -22.554	11.032	1.00	0.00	
ATOM	81		GLN	9	11.216 -21.694	10.529	1.00	0.00	
ATOM	82		GLN	9	9.902 -23.506	10.319	1.00	0.00	
ATOM	83	C	GLN	9	7.798 -20.743	11.302	1.00	0.00	
ATOM	84	0	GLN	9	7.178 -21.611	10.694	1.00	0.00	
ATOM	85	N	ALA	10	8.053 -19.539	10.776	1.00	0.00	
ATOM	86	CA	ALA	10	7.625 -19.137	9.441	1.00	0.00	
ATOM	87	CB	ALA	10	8.067 -17.697	9.172	1.00	0.00	
ATOM	88	C	ALA	10	8.151 -20.080		1.00	0.00	
711011	89	0	ALA	10	9.109 -20.817	8.583	1.00	0.00	
ATOM	90	N	TRP	11	7.522 -20.067	7.179	1.00	0.00	
ATOM	91	CA	TRP	11	7.949 -20.922	6.082	1.00	0.00	
ATOM	92	CB	TRP	11	6.817 -21.101	5.078	1.00	0.00	
ATOM	93	CG	TRP	11	5.638 -21.908	5.533	1.00	0.00	
ATOM	94		TRP	11	4.770 -21.581	6.516	1.00	0.00	
ATOM	95		TRP	11	3.811 -22.565	6.651	1.00	0.00	
ATOM	96		TRP	11	4.021 -23.586	5.745	1.00	0.00	
ATOM	97		TRP	11	3.348 -24.788	5.478	1.00	0.00	
ATOM	98		TRP	11	3.833 -25.634	4.474	1.00	0.00	
ATOM	99		TRP	11	4.974 -25.278	3.739	1.00	0.00	
ATOM	100		TRP	11	5.639 -24.068	4.010	1.00	0.00	
ATOM	101		TRP	11	5.184 -23.193	5.020	1.00	0.00	
ATOM	102	C	TRP	11	9.167 -20.307	5.397	1.00	0.00	
ATOM	103	0	TRP	11	9.237 -19.091	5.222	1.00	0.00	
ATOM	104	N	LEU	12	10.113 -21.162	5.012	1.00	0.00	
ATOM	105	CA	LEU	12	11.349 -20.807	4.333	1.00	0.00	
ATOM	106	CB	LEU	12	12.547 -21.029	5.277	1.00	0.00	

	007				(110)			000
ATOM	887	cc	I CH	12	12 477 -20 242	6 507	1 00	888
ATOM	107	CG			12.477 -20.243 13.615 -20.702			
ATOM	108	CD1		12		7.516	1.00	0.00
ATOM	109	CD2		12	12.601 -18.732	6.363	1.00	0.00
MOTA	110	C	LEU	12	11.480 -21.686	3.088	1.00	0.00
ATOM	111		LEU	12	10.618 -22.523	2.817	1.00	0.00
ATOM	112	N	TRP	13	12.575 -21.505	2.337	1.00	0.00
ATOM	113	CA	TRP	13	12.872 -22.278	1.130	1.00	0.00
ATOM	114	CB	TRP	13	14.301 -22.092	0.606	1.00	0.00
ATOM	115	CG	TRP	13	15.054 -21.050	1.322	1.00	0.00
ATOM	116		TRP		15.020 -19.767		1.00	0.00
ATOM	117		TRP	13	15.804 -19.024		1.00	0.00
ATOM	118		TRP	13	16.373 -19.843	2.807	1.00	0.00
ATOM	119		TRP		17.221 -19.620	3.906	1.00	0.00
ATOM	120		TRP		17.604 -20.712	4.709	1.00	0.00
ATOM	121		TRP	13	17.144 -22.008	4.406	1.00	0.00
ATOM	122		TRP	13	16.304 -22.216	3.301	1.00	0.00
ATOM	123		TRP	13	15.902 -21.147		1.00	0.00
ATOM	124	C	TRP	13	12.745 -23.747	1.420	1.00	0.00
ATOM	125	0	TRP	13	12.215 -24.468	0.602	1.00	0.00
ATOM	126	N	GLU		13.253 -24.208		1.00	0.00
ATOM	127	CA	GLU	14	13.162 -25.629		1.00	0.00
ATOM	128	CB	GLU	14	13.812 -25.989		1.00	0.00
ATOM	129	CG	GLU	14	15.346 -25.908		1.00	0.00
ATOM	130	CD	GLU	14	15.991 -26.527		1.00	0.00
ATOM	131		GLU	14	16.162 -27.763	2.971	1.00	0.00
ATOM	132		GLU	14	16.259 -25.760	2.019	1.00	0.00
ATOM	133	C	GLU	14	11.719 -26.129		1.00	0.00
ATOM	134	0	GLU	14	11.458 -27.007	1.898	1.00	0.00
ATOM	135	N	GLU	15	10.777 -25.577	3.486	1.00	0.00
ATOM	136	CA	GLU	15	9.390 -26.005		1.00	0.00
ATOM	137	CB	GLU		8.580 -25.421		1.00	0.00
ATOM	138	CG	GLU	15	9.214 -25.702			0.00
ATOM	139		GLU	15	9.978 -24.494	6.466	1.00	0.00
ATOM	140		GLU	15	10.713 -23.876	5.666	1.00	0.00
ATOM	141		GLU	15	9.774 -24.189	7.660	1.00	0.00
ATOM	142	C	GLU	15	8.749 -25.690	2.048	1.00	0.00
ATOM	143	0	GLU	15	8.093 -26.553	1.475	1.00	0.00
ATOM	144	N	ASP	16	8.912 -24.473	1.518	1.00	0.00
ATOM	145	CA	ASP	16	8.311 -24.079	0.244	1.00	0.00
ATOM	146	CB	ASP	16	8.541 -22.582	0.001	1.00	0.00
ATOM	147	CG	ASP	16	7.816 -21.711	1.017	1.00	0.00
ATOM	148		ASP	16	6.629 -21.988	1.292	1.00	0.00
ATOM	149		ASP	16	8.435 -20.733	1.488	1.00	0.00
ATOM	150	C	ASP	16	8.828 -24.895	-0.946	1.00	0.00
ATOM	151	0	ASP	16	8.047 -25.363	-1.770	1.00	0.00
ATOM	152	N CA	LYS	17	10.147 -25.058	-1.041	1.00	0.00
ATOM	153	CA	LYS	17 17	10.840 -25.796	-2.088	1.00	0.00
ATOM	154 155	CB CG	LYS	17 17	12.361 -25.591	-1.918	1.00	0.00
ATOM ATOM			LYS	17 17	13.196 -26.218	-3.039	1.00	0.00
ATOM	156	CD	LYS	17	14.699 -25.947	-2.864	1.00	0.00

	889				(110)			000
<b>АТОИ</b>		CE	LVC	17	15 202 20 470	1 541	1 00	890
ATOM	157	CE	LYS	17	15.292 -26.470	-1.541	1.00	0.00
ATOM	158	NZ	LYS	17	15.173 -25.501	-0.431	1.00	0.00
ATOM	159	C	LYS	17	10.407 -27.267	-2.006	1.00	0.00
ATOM	160	0	LYS	17	10.061 -27.877	-3.019	1.00	0.00
MOTA	161	N	ASN	18	10.406 -27.830	-0.789	1.00	0.00
ATOM	162	CA	ASN	18	9.987 -29.202	-0.530	1.00	0.00
ATOM	163	CB	ASN	18	10.207 -29.500	0.956	1.00	0.00
ATOM	164	CG	ASN	18	9.867 -30.926	1.361	1.00	0.00
ATOM	165	OD1	ASN	18	10.031 -31.851	0.572	1.00	0.00
ATOM	166	ND2	ASN	18	9.429 -31.097	2.609	1.00	0.00
ATOM	167	С	ASN	18	8.523 -29.392	-0.946	1.00	0.00
ATOM	168	0	ASN	18	8.178 -30.370	-1.605	1.00	0.00
ATOM	169	N	LEU	19	7.659 -28.439	-0.579	1.00	0.00
ATOM	170	CA	LEU	. 19	6.246 -28.459	-0.923	1.00	0.00
ATOM	171	CB	LEU	19	5.520 -27.309	-0.210	1.00	0.00
ATOM	172	CG	LEU	19	4.035 -27.185	-0.579	1.00	0.00
ATOM	173	CD1	LEU	19	3.258 -28.483	-0.347	1.00	0.00
ATOM	174	CD2	LEU	19	3.410 -26.050	0.241	1.00	0.00
ATOM	175	C	LEU	19	6.079 -28.410	-2.442	1.00	0.00
ATOM	176	0	LEU	19	5.287 -29.170	-2.990	1.00	0.00
ATOM	177	N	ARG	20	6.831 -27.541	-3.129	1.00	0.00
ATOM	178	CA	ARG	20	6.781 -27.428	-4.580	1.00	0.00
ATOM	179	CB	ARG	20	7.732 -26.323	-5.061	1.00	0.00
ATOM	180	CG	ARG	20	7.566 -26.050	-6.562	1.00	0.00
ATOM	181	CD	ARG	20	8.396 -24.833	-6.983	1.00	0.00
ATOM	182	NE	ARG	20	8.108 -24.449	-8.372	1.00	0.00
ATOM	183	CZ	ARG	20	8.748 -23.480	-9.050	1.00	0.00
ATOM	184		ARG	20	8.383 -23.191		1.00	0.00
ATOM	185		ARG	20	9.749 -22.800	-8.476	1.00	0.00
ATOM	186	С	ARG	20	7.090 -28.792	-5.204	1.00	0.00
ATOM	187	0	ARG	20	6.366 -29.239	-6.093	1.00	0.00
ATOM	188	N	SER	21	8.144 -29.465	-4.719	1.00	0.00
ATOM	189	CA	SER	21	8.514 -30.799	-5.183	1.00	0.00
ATOM	190	СВ	SER	21	9.747 -31.291	-4.413	1.00	0.00
ATOM	191	OG	SER	21	10.189 -32.543	-4.899	1.00	0.00
ATOM	192	C	SER	21	7.316 -31.741	-4.997	1.00	0.00
ATOM	193	0	SER	21	6.955 -32.483	-5.910	1.00	0.00
ATOM	194	N	GLY	22	6.696 -31.684		1.00	
ATOM	195	CA	GLY	22	5.530 -32.475	-3.458	1.00	0.00
ATOM	196	C	GLY	22	4.394 -32.293	-4.464	1.00	0.00
ATOM	197	0	GLY	22	3.939 -33.270	-5.051	1.00	0.00
ATOM	198	N	VAL	23	3.937 -31.052	-4.666	1.00	0.00
ATOM	199	CA	VAL	23	2.857 -30.737	-5.594	1.00	0.00
ATOM	200	CB	VAL	23	2.509 -29.237	-5.538	1.00	0.00
ATOM	200		VAL	23 23	1.449 -28.880	-6.591	1.00	0.00
ATOM	201		VAL VAL	23 23	1.950 -28.869	-4.156	1.00	0.00
ATOM	202	C	VAL VAL	23 23	3.209 -31.204	-7.008	1.00	
ATOM	203	0	VAL	23 23	2.365 -31.777		1.00	
ATOM	204	N	ARG	23 24	4.446 -30.976		1.00	
ATOM	205							
AIUM	200	CA	ARG	24	4.861 -31.402	-8.791	1.00	0.00

```
891
                                                                 892
ATOM
        207 CB
                        24
                                 6.280 -30.908 -9.095
                                                        1.00 0.00
                 ARG
                        24
                                                -9.397
                                                         1.00 0.00
        208
            CG
                 ARG
                                 6.277 - 29.403
ATOM
ATOM
        209 · CD
                 ARG
                                 7.699 -28.871
                                                -9.619
                                                        1.00
                        24
                                                               0.00
        210 NE
                 ARG
                        24
                                 8.402 -29.576 -10.703
ATOM
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        211
             CZ
                 ARG
                        24
                                 8.181 -29.418 -12.020
                                                         1.00
                                                               0.00
             NH1 ARG
                        24
                                 7.250 -28.561 -12.459
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        212
            NH2 ARG
ATOM
        213
                        24
                                 8.898 -30.127 -12.901
                                                         1.00
                                                               0.00
        214 C
ATOM
                 ARG
                        24
                                  4.764 -32.923
                                                -8.957
                                                         1.00
                                                               0.00
        215
            0
                 ARG
ATOM
                        24
                                  4.367 -33.393 -10.020
                                                         1.00
                                                               0.00
        216 N
                 LYS
                        25
                                                -7.927
ATOM
                                 5.130 -33.694
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        217 CA
                 LYS
                        25
                                  5.097 -35.149
                                                -7.989
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        218 CB
                 LYS
                        25
                                 6.032 - 35.741
                                                -6.926
                                                        1.00
                                                               0.00
        219 CG
                 LYS
                        25
                                                -7.302
ATOM
                                  7.502 -35.546
                                                         1.00
                                                               0.00
             CD
ATOM
        220
                 LYS
                        25
                                  8.387 -36.275
                                                 -6.285
                                                         1.00
                                                              0.00
ATOM
        221
            CE
                 LYS
                        25
                                  9.872 -36.162
                                                -6.645
                                                         1.00
                                                               0.00
        222 NZ
ATOM
                 LYS
                        25
                                 10.358 -34.774 -6.540
                                                         1.00
                                                               0.00
        223 C
ATOM
                 LYS
                        25
                                  3.702 -35.751
                                                -7.812
                                                        1.00
                                                               0.00
ATOM
        224 0
                 LYS
                        25
                                  3.286 -36.580
                                                -8.618
                                                        1.00
                                                               0.00
                 TYR
                                                         1.00
ATOM
        225 N
                         26
                                  3.012 -35.382
                                                -6.729
                                                               0.00
        226 CA
                 TYR
ATOM
                         26
                                  1.724 - 35.952
                                                -6.342 1.00
                                                               0.00
        227 CB
                 TYR
                                                -4.846
ATOM
                         26
                                  1.809 -36.300
                                                         1.00
                                                               0.00
        228
             CG TYR
                         26
                                  3.140 -36.951
                                                -4.493
ATOM
                                                        1.00
                                                               0.00
             CD1 TYR
ATOM
        229
                         26
                                  3.459 -38.221
                                                -5.008
                                                         1.00
                                                               0.00
             CE1 TYR
ATOM
        230
                         26
                                  4.699 -38.813
                                                 -4.710
                                                         1.00
                                                               0.00
             CZ TYR
ATOM
        231
                         26
                                  5.624 -38.138
                                                -3.895
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        232
             OH TYR
                         26
                                  6.829 - 38.708
                                                 -3.608
                                                         1.00
                                                               0.00
             CE2 TYR
ATOM
        233
                         26
                                  5.308 -36.872
                                                 -3.377
                                                         1.00
                                                               0.00
             CD2 TYR
ATOM
        234
                         26
                                  4.069 -36.280
                                                 -3.676
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        235
             C
                 TYR
                         26
                                                 -6.690
                                  0.502 - 35.099
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        236
             0
                 TYR
                         26
                                 -0.614 -35.494
                                                 -6.360
                                                         1.00
                                                               0.00
                 GLY
                                                -7.358
ATOM
        237 N
                         27
                                  0.689 - 33.954
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        238
            CA
                 GLY
                         27
                                 -0.399 -33.070
                                                -7.755
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        239
             C
                 GLY
                         27
                                 -0.922 -32.246
                                                -6.580
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        240 0
                 GLY
                         27
                                 -0.599 -32.514
                                                 -5.423
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        241 N
                 CLU
                         28
                                 -1.749 -31.235
                                                 -6.877
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        242 CA
                 GLU
                         28
                                 -2.351 -30.396
                                                 -5.851
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
             CB
                 GLU
        243
                         28
                                 -2.786 -29.049
                                                 -6.454
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        244
             CG
                 GLU
                         28
                                 -3.011 -28.001
                                                 -5.355
                                                         1.00
                                                               0.00
             CD
ATOM
        245
                 GLU
                         28
                                 -3.320 -26.620
                                                 -5.915
                                                         1.00
                                                               0.00
             OE1 GLU
ATOM
        246
                         28
                                 -2.419 -26.039
                                                 -6.556
                                                         1.00
                                                               0.00
             OE2 GLU
ATOM
        247
                         28
                                 -4.439 -26.118
                                                 -5.674
                                                         1.00
                                                                0.00
             C
ATOM
        248
                 GLU
                         28
                                 -3.514 -31.178
                                                 -5.231
                                                         1.00
                                                                0.00
             0
                 GLU
ATOM
        249
                         28
                                 -4.018 -32.123
                                                 -5.837
                                                                0.00
                                                         1.00
             N
                 GLY
ATOM
        250
                         29
                                 -3.938 -30.808
                                                -4.020
                                                                0.00
                                                         1.00
                 GLY
                                                 -3.333
ATOM
        251
             CA
                         29
                                 -5.027 -31.489
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        252
             C
                 GLY
                         29
                                 -4.659 -32.924
                                                -2.958
                                                                0.00
                                                         1.00
ATOM
        253
             0
                  GLY
                         29
                                 -5.506 -33.813 -2.982
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        254
             N
                  ASN
                         30
                                 -3.387 -33.136 -2.605
                                                         1.00
                                                                0.00
             CA
ATOM
        255
                 ASN
                         30
                                 -2.831 - 34.419 - 2.193
                                                         1.00
                                                               0.00
             CB
ATOM
        256
                 ASN
                         30
                                 -2.154 -35.110 -3.389
                                                         1.00
                                                               0.00
```

	893							894
ATOM	257	CG	ASN	30	-3.157 -35.681	-4.389	1.00	0.00
ATOM	258	0D1		30	-3.500 -36.859		1.00	0.00
ATOM	259	ND2		30	-3.634 -34.876	-5.337	1.00	0.00
ATOM	260		ASN	30	-1.846 -34.142	-1.055	1.00	0.00
ATOM	261	0	ASN	30	-0.743 -34.685	-1.020	1.00	0.00
ATOM	262	N	TRP	31	-2.253 -33.274	-0.123	1.00	0.00
ATOM	263	CA	TRP	31	-1.449 -32.858	1.019	1.00	0.00
ATOM	264	CB	TRP	31	-2.132 -31.716		1.00	0.00
ATOM	265	CG	TRP	31	-2.910 -30.781	1.783		
ATOM	266		TRP	31	-4.257 -30.719	0.911 0.829	1.00	0.00
ATOM	267		TRP	31	-4.625 -29.760		1.00	0.00
	268		TRP	31		-0.647	1.00	
ATOM	269		TRP		-3.521 -29.154		1.00	0.00
MOTA				31	-3.373 -28.147			
ATOM	270		TRP	31	-2.081 -27.741	-1.970	1.00	0.00
ATOM	271		TRP	31	-0.958 -28.341	-1.379	1.00	0.00
ATOM	272		TRP	31	-1.119 -29.355	-0.416	1.00	0.00
ATOM	273		TRP	31	-2.406 -29.785	-0.025	1.00	0.00
ATOM	274	C	TRP	31	-1.077 -34.045	1.907	1.00	0.00
ATOM	275	0 N	TRP	31	-0.019 -34.027	2.530	1.00	0.00
ATOM	276	N	SER	32	-1.922 -35.082	1.949	1.00	0.00
ATOM	277	CA	SER	32	-1.675 -36.294	2.717	1.00	0.00
ATOM	278	CB	SER	32	-2.894 -37.222	2.631	1.00	0.00
ATOM	279	OG	SER	32	-3.301 -37.417	1.285	1.00	0.00
ATOM	280	C	SER	32	-0.433 -36.989	2.161	1.00	0.00
ATOM	281	0	SER	32	0.525 -37.247	2.886	1.00	0.00
ATOM	282	N	LYS	33	-0.465 -37.277	0.857	1.00	0.00
ATOM	283	CA	LYS	33	0.618 -37.926	0.138	1.00	0.00
ATOM	284	CB	LYS	33	0.241 -38.124	-1.337	1.00	0.00
ATOM	285	CG	LYS	33	-1.070 -38.906	-1.483	1.00	0.00
ATOM	286	CD	LYS	33	-1.334 -39.246	-2.955	1.00	0.00
ATOM	287	CE	LYS	33	-2.672 -39.976	-3.142	1.00	0.00
ATOM	288	NZ	LYS	33	-3.829 -39.135	-2.774	1.00	0.00
ATOM	289	C	LYS	33	1.886 -37.089	0.289	1.00	0.00
ATOM	290	0	LYS	33	2.928 -37.612	0.673	1.00	0.00
ATOM	291	N	ILE	34	1.788 -35.786	0.004	1.00	0.00
ATOM	292	CA	ILE	34	2.903 -34.857	0.121	1.00	0.00
ATOM	293	CB	ILE	34	2.439 -33.433	-0.242	1.00	0.00
ATOM	294		ILE	34	3.481 -32.385	0.166	1.00	0.00
ATOM	295		ILE	34	2.168 -33.363	-1.756	1.00	0.00
ATOM	296		ILE	34	1.444 -32.089	-2.194	1.00	0.00
ATOM	297	C	ILE	34	3.521 -34.952	1.518	1.00	0.00
ATOM	298	0 N	ILE	34	4.728 -35.135	1.628	1.00	0.00
ATOM	299	N CA	LEU	35 35	2.710 -34.844	2.576	1.00	0.00
ATOM	300	CA	LEU	35	3.160 -34.924	3.961	1.00	0.00
ATOM	301	CB	LEU	35	1.965 -34.653	4.889	1.00	0.00
ATOM	302		LEU	35	2.280 -34.715	6.392	1.00	0.00
ATOM	303		LEU	35 35	3.363 -33.714	6.814	1.00	0.00
ATOM	304		LEU	35 25	0.993 -34.420	7.172	1.00	0.00
ATOM	305		LEU		3.815 -36.277		1.00	0.00
ATOM	306	0	LEU	35	4.799 -36.332	5.008	1.00	0.00

					(110)			INIM E O O
	895							896
ATOM	307	N	LEU	36	3.270 -37.368	3.722	1.00	0.00
ATOM	308	CA	LEU	36	3.776 -38.716	3.944	1.00	0.00
ATOM	309	CB	LEU	36	2.750 -39.725	3.401	1.00	0.00
ATOM	310	CG	LEU	36	3.065 -41.201	3.710	1.00	0.00
ATOM	311	CD1	LEU	36	1.755 -41.999	3.689	1.00	0.00
ATOM	312	CD2	LEU	36	4.023 -41.835	2.690	1.00	0.00
ATOM	313	C	LEU	36	5.161 -38.880	3.320	1.00	0.00
ATOM	314	0	LEU	36	6.112 -39.256	4.004	1.00	0.00
ATOM	315	N	HIS	37	5.268 -38.612	2.016	1.00	0.00
ATOM	316	CA.	HIS	37	6.506 -38.742	1.262	1.00	0.00
ATOM	317	CB	HIS	37	6.208 -38.567	-0.231	1.00	0.00
ATOM	318	CG	HIS	37	5.242 -39.590	-0.774	1.00	0.00
ATOM -	319	ND1	HIS	37	5.483 -40.954	-0.709	1.00	0.00
ATOM	320	CE1	HIS	37	4.434 -41.572	-1.277	1.00	0.00
ATOM	321	NE2	HIS	37	3.505 -40.721	-1.718	1.00	0.00
ATOM	322	CD2	HIS	37	4.022 -39.470	-1.397	1.00	0.00
ATOM	323	C	HIS	37	7.566 -37.743	1.726	1.00	0.00
ATOM	324	0	HIS	37	8.729 -38.106	1.885	1.00	0.00
ATOM	325	N	TYR	38	7.159 -36.487	1.927	1.00	0.00
ATOM	326	CA	TYR	38	8.013 -35.392	2.351	1.00	0.00
ATOM	327	CB	TYR	38	7.962 -34.271	1.305	1.00	0.00
ATOM	328	CG	TYR	38	8.635 -34.529	-0.030	1.00	0.00
ATOM	329	CD1	TYR	38	7.934 -34.290	-1.227	1.00	0.00
ATOM	330	CE1	TYR	38	8.561 -34.507	-2.467	1.00	0.00
ATOM	331	CZ	TYR	38	9.889 -34.963	-2.511	1.00	0.00
ATOM	332	OH	TYR	38	10.508 -35.168	-3.710	1.00	0.00
ATOM	333	CE2	TYR	38 -	10.590 -35.203	-1.318	1.00	0.00
ATOM	334	CD2	TYR	38	9.965 -34.985	-0.079	1.00	0.00
ATOM	335	C	TYR	38	7.535 -34.830	3.688	1.00	0.00
ATOM	336	0	TYR.	38	6.475 -34.216	3.757	1.00	0.00
ATOM	337	N	LYS	39	8.330 -35.004	4.748	1.00	0.00
ATOM	338	CA	LYS	39	8.000 -34.452	6.055	1.00	0.00
ATOM	339	CB	LYS	39	8.741 -35.215	7.164	1.00	0.00
ATOM	340	CG	LYS	39	10.272 -35.136	7.051	1.00	0.00
ATOM	341	CD	LYS	39	10.970 -35.770	8.264	1.00	0.00
ATOM	342	CE	LYS	39	10.697 -37.276	8.377	1.00	0.00
ATOM	343	NZ	LYS	39	11.483 -37.894	9.461	1.00	0.00
ATOM	344	C	LYS	39	8.308 -32.949	6.060	1.00	0.00
ATOM	345	0	LYS	39	9.001 -32.455	5.170	1.00	0.00
ATOM	346	N	PHE	40	7.795 -32.225	7.062	1.00	0.00
ATOM	347	CA	PHE	40	7.992 -30.787	7.221	1.00	0.00
ATOM	348	CB	PHE	40	6.774 -30.023	6.686	1.00	0.00
ATOM	349	CG	PHE	40	6.507 -30.173	5.201	1.00	0.00
ATOM	350		PHE	40	5.760 -31.263	4.717	1.00	0.00
ATOM	351		PHE	40	5.512 -31.393	3.341	1.00	0.00
ATOM	352	CZ	PHE	40	6.005 -30.435	2.439	1.00	0.00
ATOM	353		PHE	40	6.749 -29.348	2.922	1.00	0.00
ATOM	354		PHE	40	7.002 -29.216	4.297	1.00	0.00
ATOM	355	C	PHE	40	8.247 -30.454	8.694	1.00	0.00
ATOM	356	0	PHE	40	8.167 -31.330	9.553	1.00	0.00

					(430)			171#12 U
	897							898
ATOM	357	N	ASN	41	8.563 -29.183		1.00	0.00
ATOM	358	CA	ASN	41	8.873 -28.687	10.313	1.00	0.00
ATOM	359	CB	ASN	41	9.298 -27.213	10.228	1.00	0.00
ATOM	360	CG	ASN	41	9.793 -26.700	11.578	1.00	0.00
ATOM	361	OD1	ASN	41	10.937 -26.936	11.952	1.00	0.00
ATOM	362	ND2	ASN	41	8.942 -25.991	12.317	1.00	0.00
ATOM	363	C	ASN	41	7.729 -28.891	11.316	1.00	0.00
ATOM	364	0	ASN	41	7.882 -29.649	12.271	1.00	0.00
ATOM	365	N	ASN	42	6.595 -28.208	11.115	1.00	0.00
ATOM	366	CA	ASN	42	5.428 -28.280	11.998	1.00	0.00
ATOM	367	CB	ASN	42	5.553 -27.209	13.098	1.00	0.00
ATOM	368	CG	ASN	42	5.435 -25.778	12.555	1.00	0.00
ATOM	369	0D1	ASN	42	6.210 -25.376	11.690	1.00	0.00
ATOM	370		ASN	42	4.471 -25.007	13.059	1.00	0.00
ATOM	371	С	ASN	42	4.136 -28.086	11.201	1.00	0.00
ATOM	372	0	ASN	42	3.177 -27.502	11.700	1.00	0.00
ATOM	373	N	ARG	43	4.123 -28.555	9.951	1.00	0.00
ATOM	374	CA	ARG	43	3.010 -28.403	9.032	1.00	0.00
ATOM	375	СВ	ARG	43	3.558 -28.090	7.631	1.00	0.00
ATOM	376	CG	ARG	43	4.790 -27.168	7.625	1.00	0.00
ATOM	377	CD	ARG	43	4.638 -25.825	8.352	1.00	0.00
ATOM	378	NE	ARG	43	5.832 -25.004	8.109	1.00	0.00
ATOM	379	CZ	ARG	43	6.170 -23.891	8.777	1.00	0.00
ATOM	380		ARG	43	7.393 -23.376	8.636	1.00	0.00
ATOM	381		ARG	43	5.316 -23.278	9.600	1.00	0.00
ATOM	382	C	ARG	43	2.112 -29.643	9.031	1.00	0.00
ATOM	383	0	ARG	43	2.530 -30.726	9.439	1.00	0.00
ATOM	384	N	THR	43	0.874 -29.466	8.565	1.00	0.00
	385	CA	THR	44	-0.168 -30.476		1.00	0.00
ATOM				44	-1.243 -30.217		1.00	0.00
ATOM	386	CB	THR		-0.657 -30.197	10.937	1.00	0.00
ATOM	387		THR THR	44		9.250	1.00	0.00
ATOM	388			44 44	-0.800 -30.329	7.072		0.00
ATOM	389	C				6.330	1.00	0.00
ATOM	390	0 N	THR	44	-0.434 -29.420	6.730	1.00	0.00
ATOM	391	N CA	SER	45 45	-1.772 -31.182		1.00	
ATOM	392	CA	SER	45	-2.492 -31.089	5.466		
ATOM	393	CB	SER SER	45 45	-3.592 -32.157	5.430	1.00	
ATOM	394	OG C		45 45	-4.295 -32.175 -3.078 -29.680	6.657	1.00	
ATOM	395	C	SER	45 45		5.324		
ATOM	396	0 N	SER	45 46	-3.000 -29.067	4.261	1.00	
ATOM	397	N	VAL	46	-3.645 -29.169	6.423	1.00	
ATOM	398	CA	VAL	46	-4.233 -27.845	6.514	1.00	
ATOM	399	CB	VAL	46	-4.918 -27.667	7.881	1.00	
ATOM	400		VAL	46	-5.513 -26.264	8.021	1.00	
ATOM	401		2 VAL	46	-6.048 -28.683	8.082	1.00	
ATOM	402		VAL	46	-3.171 -26.766	6.269	1.00	
ATOM	403		VAL		-3.396 -25.880	5.445	1.00	
ATOM	404		MET		-2.028 -26.820	6.973	1.00	
ATOM	405		MET		-0.994 -25.801	6.786	1.00	
ATOM	406	CB	MET	47	0.154 -25.912	7.798	1.00	0.00

					(451)				003-	1350
	899							900		
ATOM	407	CG	MET	47	-0.277 -26.079	9.258	1.00	0.00		
ATOM	408	SD	MET	47	0.833 -25.304	10.457	1.00	0.00		
ATOM	409	CE	MET	47	0.164 -26.005	11.983	1.00	0.00		
ATOM	410	C	MET	47	-0.437 -25.823	5.358	1.00	0.00		
ATOM	411	0	MET	47	-0.267 -24.769	4.754	1.00	0.00		
ATOM	412	N	LEU	48	-0.160 -27.018	4.821	1.00	0.00		
ATOM	413	CA	LEU	48	0.359 -27.222	3.473	1.00	0.00		
ATOM	414	CB	LEU	48	0.539 -28.728	3.206	1.00	0.00		
ATOM	415	CG	LEU	48	1.700 -29.332	4.015	1.00	0.00		
ATOM	416		LEU	48	1.533 -30.845	4.178	1.00	0.00		
ATOM	417		LEU	48	3.041 -29.099	3.319	1.00	0.00		
ATOM	418	C	LEU	48	-0.596 -26.591	2.463	1.00	0.00		
ATOM	419	0	LEU	48	-0.182 -25.779	1.635	1.00	0.00		
ATOM	420	N	LYS	49	-1.879 -26.957	2.560	1.00	0.00		
ATOM	421	CA	LYS	49	-2.934 -26.436	1.713	1.00	0.00		
ATOM	422	CB	LYS	49	-4.285 -26.975	2.212	1.00	0.00		
	423	CG	LYS	49 49			1.00			
ATOM	423	CD			-5.496 -26.380	1.474		0.00		
ATOM			LYS	49	-6.758 -26.417	2.344	1.00	0.00		
ATOM	425	CE	LYS	49	-6.759 -25.392	3.493	1.00	0.00		
ATOM	426	NZ	LYS	49	-8.086 -25.290	4.133	1.00	0.00		
ATOM	427	C	LYS	49	-2.929 -24.910	1.755	1.00	0.00		
ATOM	428	0	LYS	49	-2.735 -24.260	0.728	1.00	0.00		
ATOM	429	N	ASP	50	-3.172 -24.346	2.942	1.00	0.00		
ATOM	430	CA	ASP	50 50	-3.260 -22.910	3.118	1.00	0.00		
ATOM	431	CB	ASP	50	-3.583 -22.562	4.567	1.00	0.00		
ATOM	432	CG	ASP	50 50	-4.001 -21.104	4.641	1.00	0.00		
ATOM	433		ASP	50	-3.238 -20.318	5.242	1.00	0.00		
ATOM	434		ASP	50	-5.085 -20.804	4.095	1.00	0.00		
ATOM	435	C	ASP	50	-2.029 -22.171	2.602	1.00	0.00		
ATOM	436	0	ASP	50	-2.171 -21.190	1.877	1.00	0.00		
ATOM	437	N	ARG	51	-0.827 -22.644	2.948	1.00	0.00		
ATOM	438	CA	ARG	51	0.414 -22.038	2.486	1.00	0.00		
ATOM	439		ARG		1.632 -22.821			0.00		
ATOM	440	CG	ARG	51	2.958 -22.298	2.408		0.00		
ATOM	441	CD	ARG	51	3.305 -20.885	2.890	1.00	0.00		
ATOM	442	NE	ARG	51	4.663 -20.492	2.477	1.00	0.00		
ATOM	443	CZ	ARG	51	5.155 -19.242	2.516	1.00	0.00		
ATOM	444		ARG	51	4.399 -18.224	2.939	1.00	0.00		
ATOM	445		ARG	51	6.416 -18.996	2.145	1.00	0.00		
ATOM	446	C	ARG	51	0.425 -21.989	0.964	1.00	0.00		
ATOM	447	0	ARG	51	0.777 -20.962	0.388	1.00	0.00		
ATOM	448	N	TRP		0.047 -23.090	0.305	1.00	0.00		
ATOM	449	CA	TRP		0.031 -23.134		1.00	0.00		
ATOM	450	CB	TRP		-0.258 -24.555	-1.607	1.00	0.00		
ATOM	451	CG	TRP		0.072 -24.798		1.00	0.00		
ATOM	452		TRP		-0.835 -24.971		1.00	0.00		
ATOM	453		TRP		-0.197 -25.184		1.00	0.00		
ATOM	454		TRP		1.176 -25.150		1.00	0.00		
ATOM	455		TRP		2.247 -25.304			0.00		
ATOM	456	CH2	TRP	52	3.561 -25.214	-5.480	1.00	0.00		
									•	

	901							902
ATOM	457	CZ3	TRP	52	3.793 -24.969	-4.115	1.00	0.00
ATOM	458	CE3	TRP	52	2.712 -24.815	-3.229	1.00	0.00
ATOM	459	CD2	TRP	52	1.377 -24.903	-3.681	1.00	0.00
ATOM	460	C	TRP	52	-0.960 -22.111	-1.690	1.00	0.00
ATOM	461	0	TRP	52	-0.622 -21.395	-2.629	1.00	0.00
ATOM	462	N	ARG	53	-2.166 -22.010	-1.110	1.00	0.00
ATOM	463	CA	ARG	53	-3.148 -21.021	-1.551	1.00	0.00
ATOM	464	CB	ARG	53	-4.439 -21.081	-0.717	1.00	0.00
ATOM	465	CG	ARG	53	-5.177 -22.419	-0.851	1.00	0.00
ATOM	466	CD	ARG	53	-6.586 -22.362	-0.246	1.00	0.00
ATOM	467	NE	ARG	53	-6.589 -21.901	1.152	1.00	0.00
ATOM	468	CZ	ARG	53	-7.699 -21.608	1.850	1.00	0.00
ATOM	469		ARG	53	-7.597 -21.106	3.086	1.00	0.00
ATOM	470		ARG	53	-8.909 -21.811	1.315	1.00	0.00
ATOM	471	C	ARG	53	-2.526 -19.625	-1.462	1.00	0.00
ATOM	472	0	ARG	53	-2.533 -18.878	-2.440	1.00	0.00
ATOM	473	N	THR	54	-1.976 -19.288	-0.288	1.00	0.00
ATOM	474	CA	THR	54	-1.322 -18.019	-0.009	1.00	0.00
ATOM	475	CB	THR	54	-0.723 -18.050	1.405	1.00	0.00
ATOM	476		THR	54	-0.007 -16.748	1.767	1.00	0.00
ATOM	477	0G1		54	-1.761 -18.263	2.339	1.00	0.00
ATOM	478	C	THR	54	-0.261 -17.712	-1.064	1.00	0.00
ATOM	479	0	THR	54	-0.245 -16.607	-1.609	1.00	0.00
ATOM	480	N	MET	55	0.608 -18.692	-1.338	1.00	0.00
ATOM	481	CA	MET	55	1.689 -18.602	-2.303	1.00	0.00
ATOM	482	CB	MET	55	2.485 -19.915	-2.287	1.00	0.00
ATOM	483	CG	MET	55	3.756 -19.840		1.00	0.00
ATOM	484	SD	MET	55	4.263 -21.389		1.00	0.00
ATOM	485	CE	MET	55	2.901 -21.595		1.00	0.00
ATOM	486	C	MET	55	1.137 -18.288		1.00	0.00
ATOM	487	0	MET	55	1.561 -17.309		1.00	0.00
ATOM	488	N	LYS	56	0.203 -19.110		1.00	0.00
ATOM	489	CA	LYS	56	-0.407 -18.940		1.00	0.00
ATOM	490	CB	LYS	56	-1.511 -19.979		1.00	0.00
ATOM	491	CG	LYS	56	-0.937 -21.392		1.00	0.00
ATOM	492	CD	LYS	56	-1.851 -22.310		1.00	0.00
ATOM	493	CE	LYS	56	-3.177 -22.679		1.00	0.00
ATOM	494	NZ	LYS	56	-3.857 -23.730		1.00	0.00
ATOM	495	C	LYS	56	-0.913 -17.514		1.00	0.00
ATOM	496	0	LYS	56	-0.798 -17.030		1.00	0.00
ATOM	497	N	LYS	57	-1.451 -16.832		1.00	0.00
ATOM	498	CA	LYS	57	-1.928 -15.459		1.00	0.00
ATOM	499	СВ	LYS	57	-2.331 -14.841		1.00	0.00
ATOM	500	CG	LYS	57	-3.483 -15.540		1.00	0.00
ATOM	501	CD	LYS	57	-4.088 -14.639		1.00	0.00
ATOM	502	CE	LYS	57	-3.353 -14.622		1.00	0.00
ATOM	503	NZ	LYS	57	-1.908 -14.339		1.00	0.00
ATOM	504	C	LYS	57	-0.853 -14.549		1.00	0.00
ATOM	505	0	LYS	57	-1.139 -13.765		1.00	0.00
ATOM	506		LEU	58	0.375 -14.637		1.00	0.00

	000			•	004
ATOM	903	CA	LEU	EO	904
ATOM	507		LEU	58 50	1.501 -13.811 -5.369 1.00 0.00
ATOM	508		LEU	58 50	2.439 -13.592 -4.167 1.00 0.00
ATOM	509		LEU	58	1.972 -12.512 -3.174 1.00 0.00
ATOM	510		LEU	58	0.645 -12.848 -2.486 1.00 0.00
ATOM	511		LEU	58	3.050 -12.324 -2.100 1.00 0.00
ATOM	512	C	LEU	58	2.289 -14.427 -6.525 1.00 0.00
ATOM	513	0	LEU	58	2.569 -13.751 -7.513 1.00 0.00
ATOM	514	N	LYS	59	2.683 -15.697 -6.388 1.00 0.00
ATOM	515	CA	LYS	59	3.505 -16.395 -7.371 1.00 0.00
ATOM	516	CB	LYS	59	4.222 -17.583 -6.708 1.00 0.00
ATOM	517	CG	LYS	59	5.746 -17.398 -6.673 1.00 0.00
ATOM	518	CD	LYS	59	6.368 -17.411 -8.079 1.00 0.00
ATOM	519	CE	LYS	59	7.897 -17.303 -8.034 1.00 0.00
ATOM	520	NZ	LYS	59	8.348 -15.997 -7.514 1.00 0.00
ATOM	521	C	LYS	59	2.768 -16.810 -8.649 1.00 0.00
ATOM	522	0	LYS	59	3.419 -17.023 -9.670 1.00 0.00
ATOM	523	N	LEU	60	1.437 -16.931 -8.608 1.00 0.00
ATOM	524	CA	LEU	60	0.600 -17.305 -9.747 1.00 0.00
ATOM	525	CB	LEU	60	0.653 -16.235 -10.854 1.00 0.00
ATOM	526	CG	LEU	60	0.418 -14.794 -10.368 1.00 0.00
ATOM	527	CD1	LEU	60	0.553 -13.834 -11.556 1.00 0.00
ATOM	528	CD2	LEU	60	-0.964 -14.619 -9.729 1.00 0.00
ATOM	529	C	LEU	60	0.896 -18.707 -10.299 1.00 0.00
ATOM	530	0	LEU	60	0.590 -18.988 -11.459 1.00 0.00
ATOM	531	N	ILE	61	1.464 -19.607 -9.482 1.00 0.00
ATOM	532	CA	ILE	61	1.746 -20.977 -9.895 1.00 0.00
ATOM	533	CB	ILE	61	2.890 -21.583 -9.067 1.00 0.00
ATOM	534	CG2	ILE	61	3.115 -23.072 -9.387 1.00 0.00
ATOM	535	CG1	ILE	61	4.165 -20.788 -9.392 1.00 0.00
ATOM	536	CD1	ILE	61	5.370 -21.321 -8.626 1.00 0.00
ATOM	537	C	ILE	61	0.429 -21.737 -9.787 1.00 0.00
ATOM	538	0	ILE	61	0.167 -22.438 -8.815 1.00 0.00
ATOM	539	N	SER	62	-0.396 -21.549 -10.816 1.00 0.00
ATOM	540	CA	SER	62	-1.734 -22.103 -10.984 1.00 0.00
ATOM	541	CB	SER	62	-2.175 -21.929 -12.441 1.00 0.00
ATOM	542	OG	SER	62	-2.200 -20.555 -12.780 1.00 0.00
ATOM	543	C	SER	62	-1.834 -23.563 -10.536 1.00 0.00
ATOM	544	0	SER	62	-2.697 -23.892 -9.723 1.00 0.00
ATOM	545	N	SER	63	-0.939 -24.410 -11.063 1.00 0.00
ATOM	546	CA	SER	63	-0.839 -25.840 -10.776 1.00 0.00
ATOM	547	CB	SER	63	-0.768 -26.103 -9.265 1.00 0.00
ATOM	548	0G	SER	63	0.168 -25.250 -8.640 1.00 0.00
ATOM	549	C	SER	63	-1.966 -26.640 -11.438 1.00 0.00
ATOM	550	0	SER	63	-2.784 -26.089 -12.174 1.00 0.00
ATOM	551	N	ASP	64	-1.987 -27.951 -11.171 1.00 0.00
ATOM	552	CA	ASP	64	-2.964 -28.895 -11.694 1.00 0.00
ATOM	553	CB	ASP	64	-2.480 -30.312 -11.349 1.00 0.00
ATOM	554	CG	ASP	64	-3.339 -31.412 -11.965 1.00 0.00
ATOM	555	0D1	ASP	64	-3.405 -32.488 -11.334 1.00 0.00
ATOM	556	OD2	ASP	64	-3.901 -31.158 -13.052 1.00 0.00

```
905
                                                                  906
        557 C
ATOM
                 ASP
                         64
                                 -4.363 -28.613 -11.126 1.00 0.00
ATOM
        558
             0
                 ASP
                         64
                                 -4.501 -27.887 -10.142
                                                         1.00
                                                                0.00
        559 N
                 SER
ATOM
                         65
                                 -5.399 -29.185 -11.749
                                                         1.00
                                                                0.00
            CA
                 SER
ATOM
        560
                         65
                                 -6.792 -29.030 -11.348
                                                         1.00
            CB
                 SER
ATOM
        561
                         65
                                 -7.288 -27.620 -11.712
                                                         1.00
        562 OG
                 SER
ATOM
                         65
                                 -8.505 -27.337 -11.047
                                                         1.00
                                                                0.00
             C
                 SER
ATOM
        563
                         65
                                 -7.644 -30.123 -12.005
                                                         1.00
                                                                0.00
             0
                 SER
                                                         1.00
ATOM
        564
                         65
                                 -7.116 -31.117 -12.498
                                                                0.00
                 GLU
            N
                                 -8.968 -29.932 -12.013
ATOM
        565
                         66
                                                         1.00
                                                                0.00
        566 CA
                 GLU
                                 -9.917 -30.863 -12.607 1.00
                                                                0.00
ATOM
                 GLU
             CB
ATOM
        567
                         66
                                -11.340 -30.493 -12.161
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        568
             CG
                 GLU
                         66
                                -12.376 -31.524 -12.625
                                                         1.00
                                                                0.00
             CD
                 GLU
ATOM
        569
                         66
                                -13.756 -31.215 -12.053
                                                         1.00
                                                                0.00
            OE1 GLU
                                                                0.00
ATOM
        570
                         66
                                -14.169 -31.951 -11.130
                                                         1.00
             OE2 GLU
ATOM
        571
                         66
                                -14.372 -30.244 -12.544
                                                         1.00
                                                                0.00
        572 C
                 GLU
                                 -9.767 -30.855 -14.132
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
                         66
                 GLU
                                                          1.00
ATOM
        573
             0
                         66
                                 -9.711 -31.914 -14.756
                                                                0.00
                 ASP
        574 N
                                 -9.697 -29.653 -14.713
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
                         67
            CA
                 ASP
ATOM
        575
                         67
                                 -9.542 -29.401 -16.137
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        576
             CB
                 ASP
                         67
                                -10.907 -29.496 -16.834
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        577
             CG
                 ASP
                                -10.800 -29.284 -18.341
                                                          1.00
                                                                0.00
                         67
             OD1 ASP
ATOM
        578
                                -11.264 -28.220 -18.805
                                                         1.00
                                                                0.00
                         67
             OD2 ASP
                                -10.290 -30.209 -19.012
                                                         1.00
ATOM
        579
                         67
                                                                0.00
ATOM
        580
             C
                 ASP
                                 -8.931 -28.004 -16.287
                                                          1.00 0.00
                         67
             OT1 ASP
                                 -9.223 -27.184 -15.385
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        581
                         67
ATOM
        582
             OT2 ASP
                                 -7.910 -27.920 -17.004
                                                         1.00
                                                                0.00
                         67
             05' GUA
ATOM
        583
                                 -7.854 -39.946
                                                 11.203
                                                         1.00
                                                                0.00
                         68
ATOM
        584
             C5' GUA
                         68
                                 -7.535 -40.813
                                                  10.134 1.00
                                                               0.00
             C4'
                                 -7.697 -40.110
ATOM
        585
                 GUA
                         68
                                                   8.782
                                                         1.00
                                                                0.00
             04'
                 GUA
                                                          1.00
ATOM
        586
                         68
                                 -8.993 - 39.565
                                                   8.649
                                                                0.00
             C1'
                 GUA
                                                          1.00
ATOM
        587
                         68
                                 -8.956 -38.541
                                                   7.680
                                                                0.00
             N9
                 GUA
                                -10.122 -37.652
                                                   7.873 1.00
                                                                0.00
ATOM
        588
                         68
ATOM
         589
              68
                  GUA
                         68
                                -10.570 -37.106
                                                   9.047
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
              N7
                  GUA
                                -11.683 -36.438
                                                   8.937
                                                          1.00
                                                                0.00
        590
                         68
ATOM
        591
              C5
                  GUA
                                -11.992 -36.533
                                                   7.584
                                                          1.00
                                                                0.00
                         68
ATOM
         592
              63
                  GUA
                         68
                                -13.101 -36.007
                                                   6.857
                                                          1.00
                                                                0.00
              06
                  GUA
                                -14.075 -35.401
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
         593
                         68
                                                   7.296
ATOM
              N1
                  GUA
                                -12.998 - 36.247
                                                   5.492
                                                          1.00
                                                                0.00
         594
                         68
              C2
                  GUA
                                -11.976 -36.955
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
         595
                                                   4.895
                         68
ATOM
         596
              N2
                  GUA
                         68
                                -11.992 -37.077
                                                   3.567 1.00
                                                                0.00
                                                   5.583 1.00
         597
              N3
                  GUA
                                -10.960 -37.496
                                                                0.00
ATOM
                         68
ATOM
              C4
                  GUA
                                -11.023 -37.246
                                                   6.917 1.00
                                                                0.00
         598
                         68
ATOM
         599
              C3'
                  GUA
                         68
                                  -6.725 -38.938
                                                   8.566
                                                          1.00
                                                                0.00
              C2'
ATOM
         600
                  GUA
                         68
                                  -7.652 -37.843
                                                   8.023
                                                          1.00
                                                                 0.00
              03'
                  GUA
                                  -5.729 -39.365
ATOM
         601
                         68
                                                   7.646 1.00
                                                                 0.00
                  THY
                                  -4.516 -38.419
                                                                 0.00
ATOM
         602
              Р
                         69
                                                   7.137
                                                          1.00
              OP1 THY
                                  -4.042 -37.609
                                                   8.281
                                                          1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         603
                         69
              OP2 THY
                                  -3.563 -39.260
                                                   6.380
                                                          1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         604
                         69
 ATOM
         605
              05'
                  THY
                         69
                                  -5.242 -37.438
                                                   6.087
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C5' THY
 ATOM
         606
                                  -6.027 -37.959
                                                   5.032 1.00 0.00
```

```
907
                                                                   908
            C4' THY
ATOM
        607
                         69
                                 -6.973 -36.900
                                                   4.454 1.00 0.00
             04'
                 THY
                                 -8.014 -36.428
                                                          1.00
ATOM
        608
                         69
                                                   5.273
                                                                 0.00
        609
             C1'
                 THY
                         69
                                 -8.496 -35.236
                                                   4.699
ATOM
                                                          1.00
                                                                 0.00
            N1
                 THY
                                 -9.384 -34.524
ATOM
        610
                         69
                                                   5.655
                                                          1.00
                                                                 0.00
                                                          1.00
             C6
                 THY
                                 -9.060 -34.484
                                                   6.989
ATOM
        611
                         69
                                                                 0.00
        612 C5
                 THY
                                 -9.862 -33.860
                                                   7.887 1.00
ATOM
                         69
                                                                 0.00
ATOM
        613
             C7
                 THY
                         69
                                 -9.383 -33.843
                                                   9.326
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 THY
ATOM
        614 C4
                         69
                                -11.110 -33.240
                                                   7.485
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 THY
ATOM
        615
             04
                         69
                                -11.907 -32.673
                                                   8.228
                                                           1.00
                                                                 0.00
             N3
                 THY
ATOM
        616
                         69
                                -11.373 -33.338
                                                   6.129
                                                          1.00
                                                                 0.00
                 THY
             C2
ATOM
        617
                         69
                                -10.559 -33.938
                                                   5.181
                                                           1.00
                                                                 0.00
                 THY
ATOM
        618
             02
                         69
                                -10.884 -33.936
                                                   3.998
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C3'
                 THY
ATOM
        619
                                 -6.262 -35.633
                         69
                                                   3.963
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C2'
                 THY
ATOM
        620
                                 -7.175 -34.514
                         69
                                                   4.474
                                                          1.00
                                                                 0.00
             03'
ATOM
        621
                 THY
                         69
                                 -6.115 -35.643
                                                   2.554
                                                          1.00
                                                                 0.00
        622
             P
                  THY
                         70
ATOM
                                 -5.281 -34.489
                                                   1.798
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        623
             OP1 THY
                         70
                                 -4.563 -35.103
                                                   0.656
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             OP2 THY
        624
                         70
                                 -4.501 -33.764
                                                          1.00
                                                   2.820
                                                                 0.00
             05' THY
        625
                         70
ATOM
                                  -6.412 -33.487
                                                   1.253
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C5' THY
ATOM
        626
                         70
                                 -7.378 -33.883
                                                   0:297
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C4'
                 THY
                                  -8.525 -32.866
ATOM
        627
                                                          1.00
                         70
                                                   0.311
                                                                 0.00
             04'
                 THY
ATOM
        628
                         70
                                  -9.008 -32.738
                                                   1.633
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C1'
                 THY
ATOM
        629
                         70
                                  -9.670 -31.501
                                                    1.738
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        630
             N1
                  THY
                         70
                                 -9.831 -31.109
                                                   3.162 1.00
                                                                 0.00
ATOM
        631
             С6
                  THY
                                 -8.777 -31.232
                                                    4.035
                         70
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        632
             C5
                  THY
                                  -8.912 -30.914
                                                                 0.00
                         70
                                                   5.347
                                                           1.00
             C7
                  THY
ATOM
        633
                         70
                                 -7.674 -31.103
                                                   6.200
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        634
             C4
                  THY
                         70
                                -10.167 -30.431
                                                    5.884
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        635
             04
                  THY
                         70
                                -10.375 -30.106
                                                   7.049
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        636
             N3
                  THY
                         70
                                -11.184 -30.356
                                                    4.948
                                                          1.00
                                                                 0.00
             C2
                  THY
ATOM
        637
                         70
                                -11.067 -30.632
                                                    3.595
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        638
             02
                  THY
                         70
                                -12.010 -30.421
                                                    2.838
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C3'
                 THY
        639
                         70
                                  -8.103 -31.444
ATOM
                                                   -0.088
                                                           1.00
                                                                 0.00
             C2'
                  THY
ATOM
        640
                         70
                                  -8.738 -30.554
                                                   0.987
                                                           1.00
                                                                 0.00
             03'
ATOM
                 THY
        641
                         70
                                  -8.559 -31.130
                                                  -1.393
                                                           1.00
                                                                 0.00
             P
ATOM
        642
                  ADE
                         71
                                  -8.161 - 29.743
                                                  -2.118
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        643
             OP1 ADE
                         71
                                  -6.853 -29.300
                                                  -1.582
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
             OP2 ADE
                                  -8.349 -29.902
        644
                         71
                                                  -3.575
                                                           1.00
                                                                 0.00
             05'
ATOM
        645
                 ADE
                         71
                                  -9.248 -28.699
                                                  -1.575
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C5'
ATOM
        646
                  ADE
                         71
                                 -10.593 -28.681
                                                  -2.003
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C4'
                 ADE
ATOM
        647
                         71
                                 -11.328 -27.571
                                                  -1.236
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        648
              04'
                 ADE
                                 -11.549 -27.956
                         71
                                                    0.123
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
        649
              C1'
                  ADE
                         71
                                 -11.239 -26.853
                                                    0.949
                                                           1.00
                                                                 0.00
             N9
                  ADE
ATOM
        650
                         71
                                 -10.969 -27.194
                                                    2.364
                                                           1.00
                                                                 0.00
                  ADE
ATOM
        651
              68
                         71
                                  -9.814 - 27.711
                                                    2.884
                                                           1.00
                                                                 0.00
              N7
                  ADE
ATOM
         652
                         71
                                  -9.721 -27.678
                                                           1.00
                                                                 0.00
                                                    4.181
ATOM
         653
              C5
                  ADE
                         71
                                 -10.945 -27.149
                                                    4.559
                                                           1.00
                                                                 0.00
              C6
                  ADE
                                 -11.496 -26.856
ATOM
        654
                         71
                                                    5.816
                                                           1.00
                                                                 0.00
ATOM
         655
              N6
                  ADE
                                 -10.828 -27.101
                                                    6.944
                                                           1.00
                                                                 0.00
                         71
             N1
                  ADE
                                 -12.698 -26.257
ATOM
         656
                         71
                                                    5.874 1.00 0.00
```

	000				(100)				(1) m 2 0
	909						. =4.0		910
ATOM	657	C2	ADE	71		-25.990	4.736	1.00	0.00
ATOM	658	N3	ADE	71		-26.234		1.00	0.00
ATOM	659	C4	ADE	71		-26.834	3.466	1.00	0.00
ATOM	660	C3'	ADE	71		-26.274	-1.174	1.00	0.00
MOTA	661	C2 <b>'</b>	ADE	71	-9.963	-26.389	0.253	1.00	0.00
MOTA	662	03'	ADE	71	-11.341	-25.156	-1.318	1.00	0.00
ATOM	663	P	GUA	72	-10.798	-23.661	-1.587	1.00	0.00
ATOM	664	0P1	GUA	72	-9.562	-23.424	-0.800	1.00	0.00
ATOM	665	0P2	GUA	72	-10.822	-23.389	-3.038	1.00	0.00
ATOM	666	05'	GUA	72	-11.966	-22.823	-0.877	1.00	0.00
ATOM	667	C5'	GUA	72	-13.323	-22.965	-1.246	1.00	0.00
ATOM	668	C4'	GUA	72	-14.204	-22.427	-0.116	1.00	0.00
ATOM	669	04'	GUA	72	-13.934	-23.139	1.087	1.00	0.00
ATOM	670	C1'	GUA	72		-22.268	2.117	1.00	0.00
ATOM	671	N9	GUA	72	-12.414	-22.902	2.901	1.00	0.00
ATOM	672	С8	GUA	72	-11.274	-23.491	2.419	1.00	0.00
ATOM	673	N7	GUA	72		-23.874	3.330	1.00	0.00
ATOM	674	C5	GUA	72		-23.551	4.519	1.00	0.00
ATOM	675	C6	GUA	72		-23.761	5.865	1.00	0.00
ATOM	676	06	GUA	72		-24.235	6.246	1.00	0.00
ATOM	677	N1	GUA	72		-23.379	6.791	1.00	0.00
ATOM	678	C2	GUA	72		-22.831	6.459	1.00	0.00
ATOM	679	N2	GUA	72		-22.470	7.457	1.00	0.00
ATOM	680	N3	GUA	72		-22.600	5.193	1.00	0.00
ATOM	681	C4	GUA	72		-22.986	4.270	1.00	0.00
ATOM	682	C3'	GUA	72		-20.952	0.172	1.00	0.00
ATOM	683	C2'	GUA	72		-21.049	1.369	1.00	0.00
		03'	GUA	72		-20.294	0.461	1.00	0.00
ATOM ATOM	684	P		73		-18.692	0.401	1.00	0.00
ATOM	685 686		GUA GUA	73 73		-18.069	-0.141	1.00	0.00
			GUA	73		-18.279	0.386	1.00	0.00
ATOM	687		GUA	73		-18.511	2.195	1.00	0.00
ATOM	688	C5'	GUA				3.171	1.00	0.00
ATOM	689			73		-18.953			
ATOM	690	C4'	GUA	73		-18.846	4.564	1.00	0.00
ATOM	691	04'	GUA	73		-19.655	4.662	1.00	0.00
ATOM	692	C1'	GUA	73		-19.013	5.549	1.00	0.00
ATOM	693	N9	GUA	73		-19.577	5.459	1.00	0.00
ATOM	694	C8	GUA	73		-19.747	4.352	1.00	0.00
ATOM	695	N7	GUA	73		-20.329	4.587	1.00	0.00
ATOM	696	C5	GUA	73		2 -20.543	5.964	1.00	0.00
ATOM	697	C6	GUA	73		-21.153	6.821	1.00	0.00
ATOM	698	06	GUA	73		-21.620	6.508	1.00	0.00
ATOM	699	N1	GUA	73		3 -21.223	8.145	1.00	0.00
ATOM	700	C2	GUA	73		-20.767	8.593	1.00	0.00
ATOM	701	N2	GUA	73		-20.890	9.887	1.00	0.00
ATOM	702	N3	GUA	73 73		-20.182	7.796	1.00	
ATOM	703	C4	GUA	73		-20.097	6.500	1.00	
ATOM	704		GUA	73		3 -17.421	4.938	1.00	
ATOM	705	C2'	GUA	73		3 -17.588	5.020	1.00	
ATOM	706	03'	GUA	73	-15.340	-17.109	6.194	1.00	0.00

```
911
                                                                  912
ATOM
        707 P
                 GUA
                         74
                                -15.251 -15.649
                                                   6.876 1.00 0.00
             OP1 GUA
ATOM
        708
                         74
                                -14.198 -14.854
                                                   6.207 1.00
                                                                0.00
ATOM
        709
             OP2 GUA
                         74
                                -16.622 -15.106
                                                   7.002 1.00
                                                                0.00
             05'
                 GUA
ATOM
        710
                         74
                                -14.720 -16.044
                                                   8.342 1.00
                                                                0.00
             C5'
                 GUA
                                -15.507 -16.833
ATOM
        711
                         74
                                                   9.214 1.00
                                                                0.00
ATOM
             C4'
                 GUA
        712
                         74
                                -14.732 -17.175
                                                  10.491
                                                         1.00
                                                                0.00
             04'
                 GUA
ATOM
        713
                         74
                                -13.534 -17.858
                                                  10.153
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        714
             C1'
                 GUA
                         74
                                -12.412 -17.186
                                                  10.694
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
             N9
                 GUA
        715
                         74
                                -11.267 -17.303
                                                   9.763
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        716
             68
                 GUA
                         74
                                -11.223 -16.965
                                                   8.433
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        717
             N7
                 GUA
                                -10.081 -17.210
                         74
                                                   7.854
                                                         1.00
                                                                0.00
ATOM
        718
             C5
                 GUA
                         74
                                 -9.310 -17.765
                                                   8.868
                                                         1.00
                                                               0.00
ATOM
        719
             6
                  GUA
                         74
                                 -7.981 -18.278
                                                   8.826
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        720
             06
                  GUA
                                 -7.227 -18.322
                         74
                                                   7.860
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        721
             N1
                  GUA
                                 -7.563 -18.786
                                                  10.051
                         74
                                                          1.00
                                                                0.00
                                                  11.189
ATOM
        722
             C2
                  GUA
                         74
                                 -8.343 -18.806
                                                          1.00
                                                                0.00
ATOM
        723
             N2
                  GUA
                         74
                                 -7.794 -19.278
                                                  12.311
                                                          1.00
                                                                0.00
             N3
                  GUA
                                                                0.00
ATOM
        724
                         74
                                 -9.593 -18.324
                                                  11.232
                                                          1.00
             C4
                 GUA
ATOM
        725
                         74
                                -10.024 -17.826
                                                  10.042
                                                          1.00
                                                                0.00
             C3'
                 GUA
ATOM
        726
                                -14.320 -15.932
                         74
                                                  11.291
                                                          1.00
                                                                0.00
        727
             C2' GUA
                                -12.878 -15.739
ATOM
                         74
                                                  10.826
                                                          1.00
                                                                 0.00
             03'
ATOM
        728
                 GUA
                                -14.425 -16.227
                         74
                                                  12.673
                                                          1.00
                                                                 0.00
             P
ATOM
        729
                  THY
                         75
                                -14.078 -15.150
                                                  13.824
                                                          1.00
                                                                 0.00
             OP1 THY
                                -15.036 -15.334
ATOM
        730
                                                 14.936
                                                          1.00
                         75
                                                                 0.00
             OP2 THY
                         75
ATOM
        731
                                -13.919 -13.817 13.202
                                                          1.00
                                                                 0.00
             05' THY
ATOM
        732
                         75
                                -12.630 -15.650
                                                  14.315
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        733
             C5'
                 THY
                         75
                                                 14.965
                                -12.480 -16.898
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             C4'
                 THY
        734
                         75
                                -11.010 -17.145
                                                 15.307
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        735
             04'
                 THY
                         75
                                -10.235 -17.093
                                                 14.123
                                                         1.00
                                                                 0.00
ATOM
             C1'
                 THY
        736
                         75
                                 -9.040 -16.390
                                                 14.373
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
             N1
                  THY
        737
                         75
                                 -8.491 -15.856
                                                  13.097
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        738
             60
                  THY
                                  -9.280 -15.104
                                                 12.255
                         75
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
        739
             C5
                  THY
                         75
                                  -8.841 -14.723
                                                 11.027
                                                         1.00
                                                                 0.00
             C7
                  THY
ATOM
         740
                         75
                                  -9.784 -13.869
                                                  10.202
                                                         1.00
                                                                 0.00
ATOM
         741
             C4
                  THY
                         75
                                  -7.537 -15.118
                                                  10.536
                                                          1.00
                                                                 0.00
                  THY
ATOM
         742
             04
                         75
                                  -7.080 -14.897
                                                   9.416
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         743
              N3
                  THY
                         75
                                  -6.790 -15.818
                                                  11.461
                                                         1.00
                                                                 0.00
              C2
                  THY
                         75
ATOM
         744
                                  -7.193 -16.206
                                                  12.727
                                                          1.00
                                                                 0.00
              02
                  THY
ATOM
         745
                         75
                                  -6.421 -16.828
                                                  13.451
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
              C3'
                  THY
         746
                         75
                                -10.429 -16.081
                                                  16.252
                                                          1.00
                                                                 0.00
              C2'
ATOM
         747
                  THY
                         75
                                  -9.509 -15.291
                                                  15.321
                                                          1.00
                                                                 0.00
              03'
                  THY
                         75
ATOM
         748
                                  -9.735 -16.735
                                                                 0.00
                                                  17.299
                                                          1.00
ATOM
         749
             P
                  THY
                         76
                                  -9.041 -15.930
                                                  18.514
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         750
              OP1 THY
                         76
                                  -9.133 -16.761
                                                  19.735
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         751
              OP2 THY
                         76
                                  -9.554 -14.542
                                                  18.525
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         752
              05' THY
                         76
                                  -7.503 -15.892
                                                  18.046
                                                          1.00
                                                                 0.00
              C5' THY
ATOM
         753
                         76
                                  -6.716 -17.067
                                                  18.039
                                                          1.00
                                                                 0.00
ATOM
         754
              C4'
                  THY
                         76
                                  -5.310 -16.764
                                                  17.521
                                                          1.00
                                                                 0.00
              04' THY
ATOM
         755
                         76
                                  -5.379 -16.314
                                                  16.178
                                                          1.00
                                                                 0.00
 ATOM
         756
              C1' THY
                         76
                                  -4.503 -15.223 16.015 1.00 0.00
```

	913							914
ATOM	757	N1	THY	76	-4.837 -14.458	14.781	1.00	0.00
ATOM	758	C6	THY	76	-5.991 -13.710	14.699	1.00	0.00
ATOM	759	C5	THY	76	-6.319 -13.048	13.561	1.00	0.00
ATOM	760	C7	THY	76	-7.612 -12.256	13.604	1.00	0.00
ATOM	761	C4	THY	76	-5.482 -13.102	12.380	1.00	0.00
ATOM	762	04	THY	76	-5.706 -12.534	11.315	1.00	0.00
ATOM	763	N3	THY	76	-4.365 -13.902	12.526	1.00	0.00
ATOM	764	C2	THY	76	-4.001 -14.599	13.669	1.00	0.00
ATOM	765	02	THY	76	-2.989 -15.302	13.660	1.00	0.00
ATOM	766	C3'	THY	76	-4.609 -15.645	18.310	1.00	0.00
ATOM	767	C2 <b>'</b>	THY	76	-4.713 -14.474	17.332	1.00	0.00
ATOM	768	03'	THY	76	-3.260 -16.019	18.516	1.00	0.00
ATOM	769	P	ADE	77	-2.332 -15.323	19.636	1.00	0.00
ATOM	770		ADE	77	-2.742 -13.912	19.799	1.00	0.00
ATOM	771		ADE	77	-2.259 -16.220	20.810	1.00	0.00
ATOM	772	05'	ADE	77	-0.910 -15.343	18.886	1.00	0.00
ATOM	773	C5'	ADE	77	-0.247 -16.561	18.624	1.00	0.00
ATOM	774	C4'	ADE	77	0.737 -16.389	17.466	1.00	0.00
ATOM	775	04'	ADE	77	0.060 -15.825	16.356	1.00	0.00
ATOM	776	C1'	ADE	77	0.728 -14.671	15.884	1.00	0.00
ATOM	777	N9	ADE	77	-0.283 -13.717	15.380	1.00	0.00
ATOM	778	C8	ADE	77	-1.430 -13.301	16.009	1.00	0.00
ATOM	779	N7	ADE	77	-2.200 -12.541	15.283	1.00	0.00
ATOM	780	C5	ADE	77	-1.500 -12.424	14.090	1.00	0.00
ATOM	781	C6	ADE	77	-1.773 -11.738	12.893	1.00	0.00
ATOM	782	N6	ADE	77	-2.889 -11.027	12.731	1.00	0.00
ATOM	783	N1	ADE	77	-0.867 -11.784	11.897	1.00	0.00
ATOM	784	C2	ADE	77	0.249 -12.488	12.082	1.00	0.00
ATOM	785	N3	ADE	77	0.601 -13.216	13.141	1.00	0.00
ATOM	786	C4	ADE	77	-0.323 -13.126	14.137	1.00	0.00
ATOM	787	C3'	ADE	77	1.914 -15.457	17.765	1.00	0.00
ATOM	788	C2'	ADE	77	1.455 -14.149	17.119	1.00	0.00
ATOM	789	03'	ADE	77	3.049 -16.035	17.143	1.00	0.00
ATOM	790	P	GUA	78	4.548 -15.555	17.458	1.00	0.00
ATOM	791	0P1		78	4.640 -15.172	18.882	1.00	0.00
ATOM	792		GUA	78	5.476 -16.573	16.919	1.00	0.00
ATOM	793	05'	GUA	78	4.672 -14.241	16.557	1.00	0.00
ATOM	794	C5'	GUA	78	4.915 -14.327	15.168	1.00	0.00
ATOM	795	C4'	GUA	78 78	4.865 -12.934	14.542	1.00	0.00
ATOM	796	04'	GUA	78	3.541 -12.458	14.464	1.00	0.00
ATOM	797	C1'	GUA	78 70	3.638 -11.074	14.228	1.00	0.00
ATOM	798	N9	GUA	78 70	2.313 -10.432	14.374	1.00	0.00
ATOM	799	C8	GUA	78 79	1.434 -10.502	15.423	1.00	0.00
ATOM ATOM	800 801	N7 C5	GUA GUA	78 78	0.284 -9.929 0.407 -9.434	15.192 13.897	1.00	0.00 $0.00$
ATOM	802	C6	GUA	78 78	-0.529 -8.732	13.075	1.00	0.00
ATOM	803	06	GUA	78	-0.329 -8.732 -1.671 -8.370	13.353	1.00	0.00
ATOM	804	N1	GUA	78	-0.020 -8.454	11.811	1.00	0.00
ATOM	805	C2	GUA	78	1.239 -8.813	11.377	1.00	0.00
ATOM	806	N2	GUA	78	1.578 -8.506	10.125	1.00	0.00
111011	500	.,.	5011	. 0	1.0.0 0.000	10.140	1.00	0.00

	015				(400)				010
1 TOV	915	110	0111	70	0.100	0 401	10 110		916
ATOM	807	N3	GUA	78	2.122	-9.461	12.148	1.00	0.00
ATOM	808	C4	GUA	78	1.649	-9.742	13.390	1.00	0.00
ATOM	809	C3'	GUA	78		-11.847	15.328	1.00	0.00
ATOM	810	C2'	GUA	78		-10.660	15.297	1.00	0.00
ATOM	811	03'	GUA	78		-11.615	14.692	1.00	0.00
ATOM	812	P	GUA	79		-10.587	15.279	1.00	0.00
ATOM	813		GUA	79		-11.033	14.826	1.00	0.00
ATOM	814		GUA	79		-10.404	16.725	1.00	0.00
ATOM	815	05'	GUA	79	7.577	-9.227	14.513	1.00	0.00
ATOM	816	C5'	GUA	79	7.755	-9.105	13.116	1.00	0.00
ATOM	817	C4'	GUA	79	7.048	-7.846	12.609	1.00	0.00
ATOM	818	04'	GUA	79	5.665	-7.906	12.901	1.00	0.00
ATOM	819	C1'	GUA	79	5.178	-6.587	12.981	1.00	0.00
ATOM	820	N9	GUA	79	3.867	-6.576	13.672	1.00	0.00
ATOM	821	C8	GUA	79	3.556	-7.109	14.898	1.00	0.00
ATOM	822	N7	GUA	79	2.307	-6.972	15.242	1.00	0.00
ATOM	823	C5	GUA	79	1.739	-6.306	14.165	1.00	0.00
ATOM	824	C6	GUA	79	0.393	-5.880	13.962	1.00	0.00
ATOM	825	06	GUA	79	-0.556	-5.975	14.736	1.00	0.00
ATOM	826	N1	GUA	79	0.200	-5.298	12.716	1.00	0.00
ATOM	827	C2	GUA	79	1.198	-5.105	11.783	1.00	0.00
ATOM	828	N2	GUA	79	0.864	-4.493	10.645	1.00	0.00
ATOM	829	N3	GUA	79	2.473	-5.473	11.984	1.00	0.00
ATOM	830	C4	GUA	79	2.678	-6.076	13.187	1.00	0.00
ATOM	831	C3'	GUA	79	7.562	-6.555	13.265	1.00	0.00
ATOM	832	C2'	GUA	79	6.275	-5.914	13.802	1.00	0.00
ATOM	833	03'	GUA	79	8.229	-5.784	12.278	1.00	0.00
ATOM	834	P	GUA	80	8.962	-4.383	12.610	1.00	0.00
ATOM	835	0P1	GUA	80	9.282	-4.337	14.053	1.00	0.00
ATOM	836	0P2	GUA	80	10.030	-4.168	11.609	1.00	0.00
ATOM	837	05'	GUA	80	7.786	-3.326	12.319	1.00	0.00
ATOM	838	C5'	GUA	80	7.306	-3.122	11.005	1.00	0.00
ATOM	839	C4"	GUA	- 80	6.024	-2.291	11.042	1.00	0.00
ATOM	840	04'	GUA	80	5.048	-2.939	11.837	1.00	0.00
ATOM	841	C1'	GUA	80	4.248	-1.946	12.431	1.00	0.00
ATOM	842	N9	GUA	80	3.466	-2.489	13.562	1.00	0.00
ATOM	843	C8	GUA	80	3.920	-3.129	14.686	1.00	0.00
ATOM	844	N7	GUA	80	2.985	-3.440	15.538	1.00	0.00
ATOM	845	C5	GUA	80	1.818	-2.988	14.931	1.00	0.00
ATOM	846	C6	GUA	80	0.463	-3.047	15.376	1.00	0.00
ATOM	847	06	GUA	80	0.026	-3.489	16.436	1.00	0.00
ATOM	848	N1	GUA	80	-0.425	-2.539	14.433	1.00	0.00
ATOM	849	C2	GUA	80	-0.058	-2.005	13.217	1.00	0.00
ATOM	850	N2	GUA	80	-1.030	-1.563	12.418	1.00	0.00
ATOM	851	N3	GUA	80	1.217	-1.913	12.811	1.00	0.00
ATOM	852	C4	GUA	80	2.102	-2.429	13.707	1.00	0.00
ATOM	853	C3'	GUA	80	6.213	-0.898	11.666	1.00	0.00
ATOM	854	C2'	GUA	80	5.305	-0.946	12.892	1.00	0.00
ATOM	855	03'	GUA	80	5.770	0.110	10.779	1.00	0.00
ATOM	856	05'	CYT	81	-9.480	-0.008	16.475	1.00	0.00

					(400)				村朋 4 0 0 。
	917								918
ATOM	857	C5'	CYT	81	-9.040	1.002	15.593	1.00	0.00
ATOM	858	C4'	CYT	81	-7.938	0.465	14.676	1.00	0.00
ATOM	859	04'	CYT	81	-6.880	-0.093	15.426	1.00	0.00
ATOM	860	C1'	CYT	81	-6.119	-0.867	14.526	1.00	0.00
ATOM	861	N1	CYT	81	-5.212	-1.795	15.244	1.00	0.00
ATOM	862	C6	CYT	81	-5.677	-2.538	16.300	1.00	0.00
ATOM	863	C5	CYT	81	-4.888	-3.428	16.943	1.00	0.00
ATOM	864	C4	CYT	81	-3.532	-3.542	16.485	1.00	0.00
ATOM	865	N4	CYT	81	-2.681	-4.379	17.082	1.00	0.00
MOTA	866	N3	CYT	81	-3.091	-2.827	15.444	1.00	0.00
ATOM	867	C2	CYT	81	-3.907	-1.958	14.787	1.00	0.00
ATOM	868	02	CYT	81	-3.483	-1.347	13.808	1.00	0.00
ATOM	869	C3'	CYT	81	-8.391	-0.679	13.757	1.00	0.00
ATOM	870	C2'	CYT	81	-7.197	-1.637	13.775	1.00	0.00
ATOM	871	03'	CYT	81	-8.686	-0.153	12.473	1.00	0.00
ATOM	872	P	CYT	82	-9.173	-1.083	11.245	1.00	0.00
ATOM	873	0P1	CYT	82	-9.677	-2.360	11.799	1.00	0.00
ATOM	874	0P2	CYT	82	-10.040	-0.267	10.367	1.00	0.00
ATOM	875	05'	CYT	82	-7.796	-1.385	10.461	1.00	0.00
ATOM	876	C5'	CYT	82	-7.104	-0.364	9.764	1.00	0.00
ATOM	877	C4'	CYT	82	-5.843	-0.929	9.097	1.00	0.00
ATOM	878	04'	CYT	82	-4.982	-1.466	10.080	1.00	0.00
ATOM	879	C1'	CYT	82	-4.370	-2.650	9.610	1.00	0.00
ATOM	880	N1	CYT	82	-4.094	-3.499	10.798	1.00	0.00
ATOM	881	C6	CYT	82	-5.117	-3.763	11.670	1.00	0.00
ATOM	882	C5	CYT	82	-4.931	-4.481	12.794	1.00	0.00
ATOM	883	C4	CYT	82	-3.602	-4.962	13.041	1.00	0.00
ATOM	884	N4	CYT	82	-3.367	-5.750	14.091	1.00	0.00
ATOM	885	N3	CYT	82	-2.593	-4.678	12.204	1.00	0.00
ATOM	886	C2	CYT	82	-2.801	-3.950	11.068	1.00	
ATOM	887	02	CYT	82	-1.863	-3.717	10.307	1.00	0.00
ATOM	888	C3'	CYT	82	-6.147	-2.065	8.110	1.00	0.00
ATOM	889	C2'	CYT	82	-5.446		8.722		0.00
ATOM	890	03'	CYT	82	-5.655	-1.699	6.830	1.00	0.00
ATOM	891	P	CYT	83	-5.979	-2.552	5.497	1.00	
ATOM	892		CYT	83	-5.940	-1.631	4.339	1.00	
ATOM	893		CYT	83	-7.183	-3.376	5.745	1.00	
ATOM	894	05'		83	-4.709	-3.534	5.406	1.00	0.00
ATOM	895	C5'		83	-3.487	-3.118	4.824	1.00	0.00
ATOM	896	C4'		83	-2.408	-4.171	5.093	1.00	0.00
ATOM	897	04'		83	-2.281	-4.356	6.486	1.00	0.00
ATOM	898	C1'	CYT	83	-1.652	-5.594	6.739	1.00	0.00
ATOM	899	N1	CYT	83	-2.228	-6.188	7.969	1.00	0.00
ATOM	900	C6	CYT	83	-3.587	-6.242	8.113	1.00	
ATOM	901	C5	CYT	83	-4.164	-6.698	9.248	1.00	
ATOM	902	C4	CYT	83	-3.281	-7.168	10.278	1.00	
ATOM	903	N4	CYT	83	-3.772	-7.660	11.416	1.00	
ATOM	904	N3	CYT	83	-1.951	-7.164	10.109	1.00	
ATOM	905	C2	CYT	83	-1.390	-6.679	8.966	1.00	
ATOM	906	02	CYT	83	-0.170	-6.696	8.825	1.00	0.00

	040				(101)				י ב נתוניו
	919	001	O. M	00	0.555				920
ATOM	907		CYT	83	-2.775	-5.563	4.572	1.00	0.00
ATOM	908		CYT	83	-1.997	-6.464	5.529	1.00	0.00
ATOM	909		CYT	83	-2.369	-5.745	3.225	1.00	0.00
ATOM	910		THY	84 .	-2.778	-7.059	2.371	1.00	0.00
ATOM	911		THY	84	-2.329	-6.856	0.976	1.00	0.00
ATOM	912	0P2		84	-4.199	-7.368	2.645	1.00	0.00
ATOM	913		THY	84	-1.889	-8.244	3.007	1.00	0.00
ATOM	914	C5'	THY	84	-0.493	-8.328	2.784	1.00	0.00
ATOM	915	C4'	THY	84	0.098	-9.413	3.691	1.00	0.00
ATOM	916	04'	THY	84	-0.354	-9.228	5.018	1.00	0.00
ATOM	917	C1'	THY	84	-0.224	-10.441	5.719	1.00	0.00
ATOM	918	N1	THY	84	-1.156	-10.458	6.881	1.00	0.00
ATOM	919	C6	THY	84	-2.457	-10.049	6.714	1.00	0.00
ATOM	920	C5	THY	84	-3.326	-10.028	7.752	1.00	0.00
ATOM	921	C7	THY	84	-4.737	-9.575	7.421	1.00	0.00
ATOM	922	C4	THY	84	-2.927	-10.431	9.084	1.00	0.00
ATOM	923	04	THY	84	-3.650	-10.429	10.075	1.00	0.00
ATOM	924	N3	THY	84	-1.609	-10.856	9.175	1.00	0.00
ATOM	925	C2	THY	84	-0.700	-10.904	8.126	1.00	0.00
ATOM	926	02	THY	84	0.437	-11.332	8.310	1.00	0.00
ATOM	927	C3'	THY	84	-0.348	-10.830	3.308	1.00	0.00
ATOM	928	C2'	THY	84	-0.620	-11.481	4.671	1.00	0.00
ATOM	929	03'	THY	84	0.675	-11.458	2.547	1.00	0.00
ATOM	930	P	ADE	85	0.579	-12.988	2.024	1.00	0.00
ATOM	931	0P1	ADE	85	-0.845	-13.331	1.800	1.00	0.00
ATOM	932	0P2	ADE	85		-13.168	0.913	1.00	0.00
ATOM	933	05'	ADE	85	1.116	-13.836	3.285	1.00	0.00
ATOM	934	C5'	ADE	85		-13.604	3.819	1.00	0.00
ATOM	935	C4'	ADE	85		-14.299	5.175	1.00	0.00
ATOM	936	04'	ADE	85		-13.887	6.080	1.00	0.00
ATOM	937	C1'	ADE	85		-15.006	6.618	1.00	0.00
ATOM	938	N9	ADE	85		-14.665	6.847	1.00	0.00
ATOM	939	С8	ADE	85	-1.492	-14.341	5.922	1.00	0.00
ATOM	940	N7	ADE	85		-13.942	6.433	1.00	0.00
ATOM	941	C5	ADE	85		-14.042	7.800	1.00	0.00
ATOM	942	C6	ADE	85	-3.224	-13.767	8.914	1.00	0.00
ATOM	943	N6	ADE	85		-13.292	8.796	1.00	0.00
ATOM	944	N1	ADE	85	-2.735	-14.012	10.142	1.00	0.00
ATOM	945	C2	ADE	85		-14.483	10.255	1.00	0.00
ATOM	946	N3	ADE	85	-0.621	-14.759	9.298	1.00	0.00
ATOM	947	C4	ADE	85		-14.511	8.066	1.00	0.00
ATOM	948	C3'	ADE	85		-15.826	5.098	1.00	0.00
ATOM	949	C2'	ADE	85		-16.070	5.539	1.00	0.00
ATOM	950	03'	ADE	85		-16.371	5.983	1.00	0.00
ATOM	951	P	ADE	86		-17.958	6.166	1.00	0.00
ATOM	952		ADE	86		-18.238	6.328	1.00	0.00
ATOM	953		ADE	86		-18.642	5.096	1.00	0.00
ATOM	954	05'	ADE	86		-18.250	7.562	1.00	0.00
ATOM	955	C5'	ADE	86		-17.803	8.778	1.00	0.00
ATOM	956	C4'	ADE	86		-18.366	9.951	1.00	0.00
							_		

921 922 ATOM 957 04' ADE 86 1.417 -17.791 9.946 1.00 0.00 C1' ADE 0.429 - 18.79310.052 1.00 0.00 ATOM 958 86 ADE 9.332 1.00 0.00 ATOM 959 N9 86 -0.784 - 18.339C8 ADE -0.957 -18.146 7.982 1.00 0.00 ATOM 960 86 ADE -2.100 -17.612 7.651 1.00 0.00 ATOM 961 N7 86 1.00 ATOM 962 C5 ADE -2.745 -17.456 8.869 0.00 86 ADE -4.009 -16.949 9.224 1.00 ATOM 963 С6 86 0.001.00 ADE 8.331 N6 -4.871 -16.456 0.00ATOM 964 86 -4.349 -16.937 10.524 1.00 ATOM 965 N1 ADE 86 0.00 11.423 C2 ADE -3.495 -17.409 1.00 0.00 ATOM 966 86 ATOM 967 N3 ADE 86 -2.277 -17.899 11.223 1.00 0.00 9.901 C4 ADE -1.955 -17.899 1.00 0.00 ATOM 968 86 C3**'** ADE 86 2.533 - 19.8909.855 1.00 0.00 ATOM 969 C2' ADE 1.079 -20.015 9.405 1.00 0.00 ATOM 970 86 971 03' ADE 86 2.815 -20.472 11.114 1.00 0.00 ATOM 972 P 11.375 ATOM CYT 87 2.718 -22.063 1.00 0.00 OP1 CYT 2.756 -22,771 10.073 1.00 0.00 ATOM 973 87 1.00 OP2 CYT 3.703 -22.422 12.422 0.00 ATOM 974 87 ATOM 975 05' CYT 87 1.236 -22.176 11.995 1.00 0.00 ATOM C5' CYT 87 0.921 - 21.52413.210 1.00 0.00 976 ATOM 977 C4' CYT 87 -0.589 - 21.44713.427 1.00 0.00 978 04' CYT 87 -1.228 -20.850 12.321 1.00 0.00 ATOM **ATOM** 979 C1' CYT 87 -2.575 -21.264 12.331 1.00 0.00 ATOM 980 N1 CYT 87 -3.205 -21.014 11.007 1.00 0.00 1.00 **ATOM** 981 60 CYT 87 -2.513 -21.278 9.849 0.00 -3.010 -20.938 1.00 0.00 ATOM 982 C5 CYT 87 8.637 CYT -4.286 -20.282 8.619 1.00 0.00 ATOM 983 C487 N4 CYT -4.784 -19.821 7.475 1.00 0.00 ATOM 984 87 ATOM 985 N3CYT 87 -4.973 -20.061 9.746 1.00 0.00 C2CYT -4.471 -20.432 10.957 1.00 0.00 ATOM 986 87 ATOM 987 02 CYT 87 -5.134 -20.234 11.971 1.00 0.00 C3' CYT -1.254 -22.816 13.600 1.00 0.00 ATOM 988 87 C2' CYT -2.435 -22.752 ATOM 989 87 12.629 1.00 0.00 03' CYT -1.632 -22.952 14.961 1.00 0.00 ATOM 990 87 P CYT -2.282 -24.302 15.559 1.00 0.00 ATOM 991 88 OP1 CYT 17.014 1.00 0.00 -2.015 -24.325 ATOM 992 88 OP2 CYT -1.855 -25.439 14.713 1.00 0.00 ATOM 993 88 05' CYT 88 -3.860 -24.062 15.329 1.00 0.00 ATOM 994 1.00 C5' CYT -4.567 -23.056 16.035 0.00 ATOM 995 88 ATOM 996 C4' CYT 88 -5.942 -22.82415.398 1.00 0.00 **ATOM** 04' CYT 88 -5.784 -22.513 14.031 1.00 0.00 997 ATOM 998 C1' CYT 88 -6.989 -22.799 13.361 1.00 0.00 ATOM 999 N1 CYT 88 -6.723 -22.994 11.914 1.00 0.00 ATOM 1000 60 CYT 88 -5.599 -23.666 11.512 1.00 0.00 C5-5.221 -23.710 10.218 1.00 0.00 ATOM 1001 CYT 88 ATOM 1002 C4 CYT 88 -6.076 -23.045 9.273 1.00 0.00 1003 N4 CYT 88 -5.748 -22.996 7.981 1.00 0.00 ATOM ATOM 1004 N3 CYT 88 -7.228 -22.480 9.658 1.00 0.00C2-7.590 -22.449 10.972 1.00 0.00 ATOM 1005 CYT 88 ATOM 1006 02 CYT -8.668 -21.966 11.302 1.00 0.00

					(403)				1गामा ८ ।
	923	•							924
ATOM	1007	C3'	CYT	88	-6.865		15.426	1.00	0.00
ATOM	1008	C2'	CYT	88	-7.436 ·		14.006	1.00	0.00
ATOM	1009	03'	CYT	88	-7 <b>.</b> 863 -		16.418	1.00	0.00
ATOM	1010	P	CYT	89	-9 <b>.</b> 029 ·		16.705	1.00	0.00
ATOM	1011		CYT	89	-9.443	-24.819	18.119	1.00	0.00
ATOM	1012	0P2	CYT	89	-8.583	-26.266	16.190	1.00	0.00
ATOM	1013	05'	CYT	89	-10.248	-24.447	15.774	1.00	0.00
ATOM	1014	C5'	CYT	89	-10.943	-23.241	16.046	1.00	0.00
ATOM	1015	C4'	CYT	89	-12.050	-23.018	15.008	1.00	0.00
ATOM	1016	04'	CYT	89	-11.482	-22.957	13.714	1.00	0.00
ATOM	1017	C1'	CYT	89	-12.313	-23.603	12.770	1.00	0.00
ATOM	1018	N1	CYT	89	-11.449	-24.164	11.700	1.00	0.00
ATOM	1019	C6	CYT	89	-10.339	-24.884	12.055	1.00	0.00
ATOM	1020	C5	CYT	89	-9.438	-25.305	11.145	1.00	0.00
ATOM	1021	C4	CYT	89	-9.704	-24.972	9.777	1.00	0.00
ATOM	1022	N4	CYT	89		-25.337	8.824	1.00	0.00
ATOM	1023	N3	CYT	89	-10.813		9.419	1.00	0.00
ATOM	1024	C2	CYT	89	-11.717	-23.899	10.358	1.00	0.00
ATOM	1025	02	CYT	89	-12.742		10.010	1.00	0.00
ATOM	1026	C3'	CYT	89	-13.083		14.983	1.00	0.00
ATOM	1027	C2'	CYT	89	-12.950		13.577	1.00	0.00
ATOM	1028	03'	CYT	89	-14.377		15.253	1.00	0.00
ATOM	1029	P	THY	90	-15.708		15.296	1.00	0.00
ATOM	1030	0P1		90	-15.294		15.415	1.00	0.00
ATOM	1031	0P2		90	-16.642		16.287	1.00	0.00
ATOM	1032	05'	THY	90	-16.342		13.827	1.00	0.00
ATOM	1033	C5'	THY	90	-16.849		13.416	1.00	0.00
ATOM	1034	C4'	THY	90	-17.283		11.946	1.00	0.00
ATOM	1035	04'	THY	90	-16.191		11.165	1.00	0.00
ATOM	1036	C1'	THY	90	-16.611		10.241	1.00	0.00
ATOM	1037	N1	THY	90	-15.462	_	9.991	1.00	0.00
ATOM	1038	C6	THY	90	-14.939		11.024	1.00	0.00
ATOM	1039	C5	THY	90	-13.803		10.875	1.00	0.00
ATOM	1040	C7	THY	90	-13.359		12.069	1.00	0.00
ATOM	1041	C4	THY	90	-13.063		9.635	1.00	0.00
ATOM	1042	04	THY	90	-11.984		9.454	1.00	0.00
ATOM	1043	N3	THY	90	-13.670		8.620	1.00	0.00
ATOM	1044	C2	THY	90	-14.862		8.731	1.00	0.00
ATOM	1045	02	THY	90	-15.345		7.746	1.00	0.00
ATOM	1046	C3'	THY	90	-18.455		11.673	1.00	0.00
ATOM	1047	C2'	THY	90	-17.779		10.951	1.00	0.00
ATOM	1048	03'	THY	90	-19.427		10.876	1.00	0.00
ATOM	1049	P	ADE	91	-20.852		10.509	1.00	0.00
ATOM	1050		ADE	91	-21.794		10.143	1.00	0.00
ATOM	1051		ADE	91	-21.212		11.579	1.00	0.00
ATOM	1052	05'	ADE	91	-20.506		9.178	1.00	0.00
ATOM	1053	C5'	ADE	91	-20.287		7.940	1.00	0.00
ATOM	1054	C4'	ADE	91	-19.730		6.907	1.00	0.00
ATOM	1055	04'	ADE	91	-18.476		7.302	1.00	0.00
ATOM	1056	C1'		91	-18.240		6.527	1.00	0.00
010	2000	~ +		0.1	10.010	23.000	3.361	00	5.50

					(404)			1911111 2
	925							926
ATOM	1057		ADE	91	-17.156 -27.740	7.134	1.00	0.00
ATOM	1058	C8	ADE	91	-17.006 -28.078	8.452	1.00	0.00
ATOM	1059	N7	ADE	91	-15.877 -28.675	8.725	1.00	0.00
ATOM	1060	C5	ADE	91	-15.254 -28.767	7.484	1.00	0.00
ATOM	1061	C6	ADE	91	-14.013 -29.284	7.065	1.00	0.00
ATOM	1062	N6	ADE	91	-13.117 -29.792	7.915	1.00	0.00
ATOM	1063	N1	ADE	91	-13.725 -29.287	5.751	1.00	0.00
ATOM	1064	C2	ADE	91	-14.611 -28.783	4.894	1.00	0.00
ATOM	1065	N3	ADE	91	-15.781 -28.215	5.165	1.00	0.00
ATOM	1066	C4	ADE	91	-16.048 -28.240	6.498	1.00	0.00
ATOM	1067	C3'	ADE	91	-20.597 -26.537	6.678	1.00	0.00
ATOM	1068	C2'	ADE	91	-19.573 -27.675	6.629	1.00	0.00
ATOM	1069	03'	ADE	91	-21.326 -26.349	5.474	1.00	0.00
ATOM	1070	P	ADE	92	-22.291 -27.478	4.837	1.00	0.00
ATOM	1071	0P1	ADE	92	-23.248 -26.806	3.931	1.00	0.00
ATOM	1072		ADE	92	-22.790 -28.344	5.927	1.00	0.00
ATOM	1073	05'	ADE	92	-21.270 -28.338	3.933	1.00	0.00
ATOM	1074	C5'	ADE	92	-20.588 -27.751	2.841	1.00	0.00
ATOM	1075	C4'	ADE	92	-19.557 -28.727	2.263	1.00	0.00
ATOM	1076	04'	ADE	92	-18.581 -29.055	3.239	1.00	0.00
ATOM	1077	C1'	ADE	92	-18.226 -30.413	3.091	1.00	0.00
ATOM	1078	N9	ADE	92	-17.603 -30.920	4.337	1.00	0.00
ATOM	1079	C8	ADE	92	-18.121 -30.899	5.608	1.00	0.00
TOM	1080	N7	ADE	92	-17.319 -31.355	6.527	1.00	0.00
TOM	1081	C5	ADE	92	-16.184 -31.715	5.813	1.00	0.00
MOT.	1082	C6	ADE	92	-14.948 -32.265	6.204	1.00	0.00
ATOM	1083	N6	ADE	92	-14.662 -32.521	7.482	1.00	0.00
TOM	1084	N1	ADE	92	-14.021 -32.511	5.259	1.00	0.00
OM	1085	C2	ADE	92	-14.313 -32.233	3.991	1.00	0.00
TOM	1086	N3	ADE	92	-15.434 -31.715	3.495	1.00	0.00
ATOM	1087	C4	ADE	92	-16.346 -31.467	4.473	1.00	0.00
ATOM	1088	C3'	ADE	92	-20.178 -30.060	1.815	1.00	0.00
ATOM	1089	C2'	ADE	92	-19.596 -31.037	2.838	1.00	0.00
ATOM	1090	03'	ADE	92	-19.765 -30.329	0.485	1.00	0.00
ATOM	1091	P	CYT	93	-20.333 -31.577	-0.366	1.00	0.00
ATOM	1092		CYT	93	-21.403 -32.243	0.408	1.00	0.00
ATOM	1093		CYT	93	-20.595 -31.120	-1.749	1.00	0.00
	. 1094	05'		93	-19.059 -32.556	-0.390	1.00	0.00
ATOM	1095	C5'	CYT	93	-17.931 -32.269	-1.197	1.00	0.00
ATOM	1096	C4'	CYT	93	-16.832 -33.294	-0.912	1.00	
ATOM	1097	04'	CYT	93	-16.531 -33.265	0.465	1.00	0.00
ATOM	1098	C1'	CYT	93	-16.067 -34.533	0.866	1.00	0.00
ATOM	1099	N1	CYT	93	-16.303 -34.685	2.323	1.00	
ATOM	1100	C6	CYT	93	-17.499 -34.294	2.869	1.00	
ATOM	1101	C5	CYT	93	-17.743 -34.395	4.194	1.00	
ATOM	1101	C4	CYT	93	-16.684 -34.922	5.008	1.00	
ATOM	1102	N4	CYT	93	-16.806 -34.966	6.335	1.00	
ATOM	1103	N3	CYT	93	-15.525 -35.317	4.467	1.00	
ATOM	1104	C2	CYT	93	-15.302 -35.222	3.127	1.00	
ATOM	1103	02	CYT	93	-14.232 -35.604	2.658	1.00	
VIOW	1100	UZ	011	33	17.434 33.004	2.000	1.00	0.00

	020				(400)	020
ATOM	929	IICO -	ı vc	2	1 044 21 001	930
ATOM	27	HG2		2	1.844 -21.981	30.704 1.01 0.12
ATOM	28		LYS	2	2.552 -22.114	32.737 12.01 -0.18
ATOM	29	HD1		2	3.342 -22.753	32.340 1.01 0.12
ATOM	30	HD2		2	2.982 -21.394	33.427 1.01 0.12
ATOM	31		LYS	2	1.559 -22.974	33.527 12.01 -0.04
	. 32	HE1		2	0.798 -23.387	32.863 1.01 0.10
ATOM	33	HE2		2	2.107 -23.799	33.985 1.01 0.10
ATOM	34	NZ	LYS	2	0.933 -22.204	
ATOM	35	HZ1		2	0.325 -22.799	
ATOM	36	HZ2	LYS	2	1.666 -21.841	35.229 1.01 0.29
ATOM	37	HZ3	LYS	2	0.405 -21.428	.34.249 1.01 0.29
ATOM	38	C	LYS	2	4.747 -19.007	30.143 12.01 0.62
ATOM	39	0	LYS	2	4.169 -17.926	30.276 16.00 -0.50
ATOM	40	N	HIS	3	5.878 -19.125	29.440 14.01 -0.46
ATOM	41	HN	HIS	3	6.304 -20.042	29.375 1.01 0.25
ATOM	42	CA	HIS	3	6.547 -18.010	28.781 12.01 0.03
ATOM	43	HA	HIS	3	6.475 -17.123	29.412 1.01 0.05
ATOM	44	CB	HIS	3	8.040 -18.324	28.628 12.01 -0.10
ATOM	45	HB1	HIS	3	8.158 -19.206	27.996 1.01 0.04
ATOM	46	HB2	HIS	3	8.532 -17.481	28.141 1.01 0.04
ATOM	47	CG	HIS	3	8.749 -18.570	29.936 12.01 -0.03
ATOM	48	ND1	HIS	3	10.052 -19.041	29.992 14.01 -0.15
ATOM	49	HD1	HIS	3	10.644 -19.260	29.203 1.01 0.23
ATOM	50	CE1		3	10.383 -19.151	31.290 12.01 0.24
ATOM	51	HE1		3	11.346 -19.498	31.634 1.01 0.04
ATOM	52	NE2		3	9.392 -18.789	32.109 14.01 -0.50
ATOM	53	CD2		3	8.363 -18.419	31.248 12.01 0.20
ATOM	54	HD2		3	7.396 -18.066	31.574 1.01 0.02
ATOM	55	C	HIS	3	5.883 -17.673	27.442 12.01 0.62
ATOM	56	Ó	HIS	3	6.554 -17.618	
ATOM	57	N	ARG	4	4.563 -17.442	
ATOM	58	HN	ARG	4	4.111 -17.519	
ATOM	59	CA	ARG	4	3.702 -17.090	26.345 12.01 0.03
ATOM	60	HA	ARG	4	2.721 -16.866	26.768 1.01 0.05
ATOM	61	СВ	ARG	4	4.162 -15.814	
ATOM	62	HB1		4	5.205 -15.874	
ATOM	63		ARG	4	3.566 -15.746	24.704 1.01 0.06
ATOM	64	CG	ARG	4	3.907 -14.498	26.372 12.01 -0.10
ATOM	65		ARG	4	3.997 -13.701	25.631 1.01 0.07
ATOM	66		ARG	4	2.886 -14.473	26.757 1.01 0.07
ATOM	67	CD	ARG	4	4.903 -14.163	27.492 12.01 -0.23
ATOM	68		ARG	4	5.915 -14.417	27.169 1.01 0.13
ATOM	69		ARG	4	4.847 -13.085	27.656 1.01 0.13
ATOM	70	NE	ARG	4	4.585 -14.844	28.756 14.01 -0.32
ATOM	71	HE	ARG	4	3.877 -15.562	28.714 1.01 0.27
ATOM	72		ARG	4	5.172 -14.595	
ATOM	73		ARG	4	6.053 -13.594	
ATOM		HH11		4	6.496 -13.400	
ATOM		НН12		4	6.279 -13.021	
ATOM	76		ARG	4	4.882 -15.362	
• • • •				-		

	931				• •				932
ATOM		НН21	ARG	4	5.280	-15.171	31.904	1.01	0.36
ATOM		НН22		4		-16.202	30.872	1.01	0.36
ATOM	79	С	ARG	4		-18.268	25.386		0.62
ATOM	80	0	ARG	4		-18.589	25.087		
ATOM	81	N	ALA	5		-18.900	24.915		
ATOM	82	HN	ALA	5		-18.565		1.01	0.25
ATOM	83	CA	ALA	5		-20.040	24.005		0.03
ATOM	84	НА	ALA	5		-20.295	23.791	1.01	0.05
ATOM	85	СВ	ALA	5		-21.266	24.677		
ATOM	86		ALA	5		-21.098	24.888		0.04
ATOM	87		ALA	5		-22.130	24.018		0.04
ATOM	88		ALA	5		-21.481	25.611	1.01	0.04
ATOM	89	С	ALA	5		-19.678	22.675		0.62
ATOM	90	0	ALA	5		-20.232	22.320		
ATOM	91	N	ARG	6		-18.740	21.947		
ATOM	92	HN	ARG	6	5.356	-18.330	22.303		0.25
ATOM	93	CA	ARG	6	4.042	-18.253	20.655		0.03
ATOM	94	HA	ARG	6	3.289	-18.925	20.241	1.01	0.05
ATOM	95	CB	ARG	6	3.416	-16.858	20.806	12.01	-0.08
ATOM	96	HB1	ARG	6	4.192	-16.130	21.048	1.01	0.06
ATOM	97	HB2	ARG	6	2.957	-16.575	19.858	1.01	0.06
ATOM	98	CG	ARG	6	2.357	-16.834	21.914	12.01	-0.10
ATOM	99	HG1	ARG	6	1.637	-17.632	21.730	1.01	0.07
ATOM	100	HG2	ARG	6	2.844	-17:010	22.871	1.01	0.07
ATOM	101	CD	ARG	6	1.649	-15.477	21.976	12.01	-0.23
ATOM	102	HD1	ARG	6	2.395	-14.693	21.836	1.01	0.13
ATOM	103	HD2	ARG	6	0.926	-15.389	21.167	1.01	0.13
ATOM	104		ARG	6	1.007	-15.237	23.279	14.01	-0.32
ATOM	105		ARG	6	1.318	-14.407		1.01	0.27
ATOM	106		ARG	6		-16.007	23.891		0.76
ATOM	107		ARG			-15.703	25.140		
ATOM		HH11		6		-16.265	25.614		0.36
ATOM		НН12		6		-14.893		1.01	0.36
ATOM	110		ARG	6		-17.072	23.294		
ATOM		HH21		6		-17.648	23.764		
ATOM		HH22		6		-17.234	22.299		0.36
ATOM	113		ARG	6		-18.211 -17.525	19.726		0.62
ATOM ATOM	114 115		ARG Lys	6 7		-18.952	20.029 18.614		
ATOM	116		LYS	7		-19.499	18.423		
ATOM	117		LYS	7		-19.006	17.649		
ATOM	118		LYS	7		-17.997	17.502		0.05
ATOM	119		LYS	, 7		-19.873	18.179		
ATOM	120		LYS	7		-19.522	19.169		
ATOM	121		LYS	7		-20.912	18.264		
ATOM	122		LYS	7		-19.774	17.250		
ATOM	123		LYS	7		-18.732	17.207		
ATOM	124		LYS	7		-20.098	16.250		0.12
ATOM	125		LYS	7		-20.647	17.766		
ATOM	126		LYS	7	10.058	-20.339	18.784		

					(1007)		191992
	933	*****		_			934
ATOM	127	HD2		7	9.494 -21.69		.01 0.12
ATOM	128		LYS	7	11.070 -20.50		
MOTA	129	HE1		7	11.394 -19.46		.01 0.10
ATOM	130	HE2		7	11.865 -21.13		.01 0.10
ATOM	131	NZ	LYS	7	10.846 -20.93	36 15.505 14.	.01 -0.14
ATOM	132	HZ1	LYS	7	10.539 -21.89	99 15.490 1.	.01 0.29
ATOM	133	HZ2	LYS	7	10.142 -20.3	55 15.073 1	.01 0.29
ATOM	134	HZ3	LYS	7	11.706 -20.8	54 14.981 1.	.01 0.29
ATOM	135	C	LYS	7	5.760 -19.5	15 16.308 12	.01 0.62
ATOM	136	0	LYS	7	5.839 -20.70	09 16.020 16	.00 -0.50
ATOM	137	N	ARG	8	5.238 -18.60	06 15.482 14	.01 -0.46
ATOM	138	HN	ARG	8	5.213 -17.63	34 15.793 1	.01 0.25
ATOM	139	CA	ARG	8	4.736 -18.93	31 14.152 12	.01 0.03
ATOM	140	HA	ARG	8	3.956 -19.69	90 14.227 1	.01 0.05
ATOM	141	СВ	ARG	8	4.169 -17.6	55 13.516 12	.01 -0.08
ATOM	142	HB1		8	4.872 -16.8		.01 0.06
ATOM	143	HB2		8	4.085 -17.7		.01 0.06
ATOM	144	CG	ARG	8	2.803 -17.2		
ATOM	145	HG1		8	2.893 -17.2		.01 0.07
ATOM	146	HG2		8	2.564 -16.2		
ATOM	147	CD	ARG	8	1.655 -18.1		
ATOM	148	HD1		8	0.933 -17.6		.01 0.13
ATOM	149	HD2		8	2.028 -18.9		.01 0.13
ATOM	150	NE	ARG	8	1.036 -18.8		
ATOM	151	HE	ARG	8	1.689 -19.2		.01 0.27
ATOM	152	CZ	ARG	8	-0.271 -18.8		
ATOM	153		ARG	8	-0.637 -19.3		
ATOM		НН11		8	-1.612 -19.3		.01 0.36
ATOM		НН12		8	0.057 -19.6		.01 0.36
ATOM	156		ARG	8	-1.215 -18.4		
ATOM		HH21		8	-2.178 -18.3		.01 0.36
ATOM		НН22		8	-1.000 -18.2		
ATOM	159	C	ARG	8	5.898 -19.4		
ATOM	160	0	ARG	8	6.904 -18.7		
ATOM	161	N	GLN	9	5.787 -20.7		
ATOM	162	HN	GLN	9	4.948 -21.2		.01 0.40
ATOM	163		GLN	9	6.857 -21.2		
ATOM	164	HA	GLN	9	7.821 -21.0		
ATOM	165	CB	GLN	9	6.749 -22.8		
ATOM	166		GLN	9	5.772 -23.1		.01 0.10
ATOM	167		GLN	9	7.510 -23.2		.01 0.04
ATOM	168		GLN	9	6.938 -23.4		
ATOM	169		GLN	9	7.934 -23.2		
				9	6.198 -23.0		
ATOM	170	CD	GLN GLN	9			.01 0.06
ATOM	171				6.768 -24.9		
ATOM	172		GLN	9	5.951 -25.5		.00 -0.47
ATOM	173		GLN	9	7.549 -25.6		.01 -0.87
ATOM		HE21		9	7.458 -26.6		
ATOM		HE22		9	8.214 -25.1		
ATOM	176	С	GLN	9	6.833 -20.6	96 10.583 12	.01 0.62

					(403)	101#12
	935					936
ATOM	177		GLN	9		9.694 16.00 -0.50
ATOM	178		ALA	10		10.372 14.01 -0.46
ATOM	179		ALA	10	8.070 -19.198	11.149 1.01 0.25
ATOM	180		ALA	10		9.076 12.01 0.03
ATOM	181	HA	ALA	10	6.671 -18.609	8.755 1.01 0.05
ATOM	182	CB	ALA	10	8.541 -17.690	9.204 12.01 -0.10
ATOM	183	HB1	ALA	10	9.541 -17.970	9.539 1.01 0.04
ATOM	184	HB2	ALA	10	8.615 -17.194	8.236 1.01 0.04
ATOM	185	HB3	ALA	10	8.102 -16.999	9.925 1.01 0.04
ATOM	186	С	ALA	10	8.246 -19.911	8.055 12.01 0.62
ATOM	187	0	ALA	10	9.291 -20.508	8.312 16.00 -0.50
ATOM	188	N	TRP	11	7.583 -20.086	6.909 14.01 -0.46
ATOM	189	HN	TRP	11	6.721 -19.569	6.738 1.01 0.25
ATOM	190	CA	TRP	11	8.054 -20.985	5.866 12.01 0.03
ATOM	191	HA	TRP	11	8.397 -21.920	
ATOM	192	СВ	TRP	11	6.920 -21.309	
ATOM	193	HB1	TRP	11	6.493 -20.367	
ATOM	194		TRP			4.026 1.01 0.04
ATOM	195	CG	TRP			5.362 12.01 -0.14
ATOM	196			11		6.340 12.01 0.04
ATOM	197		TRP		4.890 -21.008	
ATOM	198		TRP			6.478 14.01 -0.35
ATOM	199		TRP			
ATOM	200		TRP		4.276 -23.954	
ATOM	201		TRP -			5.337 12.01 -0.17
ATOM	202		TRP	11	2.794 -25.495	
ATOM	203		TRP		4.184 -26.022	
ATOM	204		TRP	11		
ATOM	205		TRP			3.605 12.01 -0.07
ATOM	206		TRP			2.836 1.01 0.06
ATOM	207		TRP			3.865 12.01 -0.17
ATOM	208		TRP			3.287 1.01 0.09
ATOM	209		TRP	11	5.420 -23.508	4.864 12.01 0.15
ATOM	210	C	TRP	11	9.217 -20.344	5.101 12.01 0.62
ATOM	211	0	TRP	11	9.340 -19.121	5.046 16.00 -0.50
ATOM	212	N	LEU	12	10.063 -21.189	4.503 14.01 -0.46
ATOM	213	HN	LEU	12	9.882 -22.180	4.588 1.01 0.25
ATOM	214	CA	LEU	12	11.224 -20.822	3.701 12.01 0.03
ATOM	215	HA	LEU	12	11.108 -19.818	3.294 1.01 0.05
ATOM	216	CB	LEU	12	12.508 -20.926	4.543 12.01 -0.06
ATOM	217		LEU	12	12.579 -21.947	4.921 1.01 0.03
ATOM	218		LEU	12	13.372 -20.741	3.903 1.01 0.03
ATOM	219	CG	LEU	12	12.578 -19.956	5.735 12.01 -0.01
ATOM	220	HG	LEU	12	11.695 -20.070	
ATOM	220		LEU	12	13.805 -20.304	6.363 1.01 0.03 6.586 12.01 -0.11
ATOM		HD11		12	13.728 -21.331	
ATOM		HD12		12	14.715 -20.199	
ATOM		HD13		12	13.859 -19.637	5.994 1.01 0.03 7.447 1.01 0.03
ATOM		CD2		12	12.689 -18.496	7.447 1.01 0.03 5.277 12.01 -0.11
ATOM		HD21		12	11.797 -18.195	
VI OW	440	IMCI	LEU	12	11.131 -10.133	4.729 1.01 0.03

	937				(., 0)	938
ATOM		HD22	LEII	12	12.790 -17.848	
ATOM		HD23		12	13.562 -18.369	
ATOM	229	C	LEU	12	11.292 -21.802	
ATOM	230		LEU	12	10.537 -22.769	
ATOM	231	N	TRP	13	12.205 -21.579	
ATOM	232	HN	TRP	13	12.799 -20.775	
ATOM	233	CA	TRP	13	12.393 -22.442	0.402 12.01 0.03
ATOM	234	HA	TRP	13	11.489 -22.415	-0.201 1.01 0.05
ATOM	235	СВ	TRP	13	13.519 -21.969	-0.509 12.01 -0.10
ATOM	236		TRP	13	13.775 -22.740	-1.231 1.01 0.04
ATOM	237		TRP	13	13.131 -21.125	
ATOM	238	CG		13		0.189 12.01 -0.14
ATOM	239		TRP	13		0.300 12.01 0.04
ATOM	240	HD1	TRP	13	14.418 -19.513	-0.129 1.01 0.09
ATOM	241	NE1	TRP	13	16.260 -20.090	0.987 14.01 -0.35
ATOM	242	HE1	TRP	13	16.713 -19.213	1.202 1.01 0.27
ATOM	243	CE2	TRP	13	16.769 -21.321	1.358 12.01 0.15
ATOM	244	CZ2	TRP	13	17.921 -21.702	2.061 12.01 -0.17
ATOM	245	HZ2	TRP	13	18.613 -20.956	2.424 1.01 0.08
ATOM	246	CH2	TRP	13	18.166 -23.066	2.287 12.01 -0.08
ATOM	247	HH2	TRP	13	19.047 -23.374	2.830 1.01 0.07
ATOM	248	CZ3	TRP	13	17.259 -24.028	1.809 12.01 -0.07
ATOM	249	HZ3	TRP	13	17.450 -25.076	1.986 1.01 0.06
ATOM	250	CE3	TRP	13	16.106 -23.636	1.105 12.01 -0.17
ATOM	251	HE3	TRP	13	15.430 -24.396	0.753 1.01 0.09
ATOM	252	CD2	TRP	13	15.826 -22.273	0.860 12.01 0.15
ATOM	253	C	TRP	13	12.642 -23.891	0.763 12.01 0.62
ATOM	254	0	TRP	13	12.508 -24.746	-0.098 16.00 -0.50
ATOM	255		GLU	14	13.002 -24.208	
ATOM	256		GLU	14	13.115 -23.481	
ATOM	257		GLU	14	13.176 -25.604	
ATOM	258		GLU	14		1.624 1.01 0.05
ATOM	259		GLU	14	13.699 -25.698	3.787 12.01 -0.18
ATOM	260		GLU	14	14.702 -25.271	3.829 1.01 0.09
ATOM	261		GLU	14	13.053 -25.115	4.446 1.01 0.09
ATOM	262			14	13.756 -27.127	4.337 12.01 -0.40
ATOM	263		GLU	14	12.777 -27.601 14.471 -27.715	4.271 1.01 0.07 3.759 1.01 0.07
ATOM	264		GLU	14		
ATOM	265		GLU GLU	14	14.182 -27.120 13.289 -27.304	5.802 12.01 0.71 6.660 16.00 -0.72
ATOM Atom	266 267		GLU:	14 14	15.390 -26.905	6.036 16.00 -0.72
ATOM	268		GLU	14	11.823 -26.289	2.146 12.01 0.62
ATOM	269		GLU	14	11.669 -27.176	1.303 16.00 -0.50
ATOM	270		GLU	15	10.839 -25.840	2.920 14.01 -0.46
ATOM	271		GLU	15	11.040 -25.092	3.570 1.01 0.25
ATOM	272		GLU	15	9.499 -26.381	2.878 12.01 0.03
ATOM	273		GLU	15	9.572 -27.468	2.829 1.01 0.05
ATOM	274		GLU	15	8.785 -26.038	4.184 12.01 -0.18
ATOM	275		GLU	15	8.696 -24.956	4.288 1.01 0.09
ATOM	276		GLU	15	7.792 -26.485	4.169 1.01 0.09

	939				()	940
ATOM	277	CG	GLII	15	9 551 -26 601	5.388 12.01 -0.40
ATOM	278	HG1		15	9.769 -27.657	
ATOM	279	HG2		15		
ATOM	280		GLU	15	8.739 -26.444	
ATOM	281		GLU	15	8.275 -25.311	
ATOM	282	0E2		15	8.590 -27.455	7.382 16.00 -0.72
ATOM	283	C	GLU	15	8.741 -25.920	1.632 12.01 0.62
ATOM	284	0	GLU	15		
ATOM	285		ASP			1.223 14.01 -0.46
ATOM	286		ASP	16		1.750 1.01 0.25
ATOM	287		ASP	16	8.205 -24.122	
ATOM	288	HA	ASP	16	7.144 -24.367	
ATOM	289		ASP	16		0.122 1.01 0.05 -0.030 12.01 -0.40
ATOM	290		ASP	16		
ATOM	291		ASP	16	9.381 -22.310	-0.009 1.01 0.07 -0.974 1.01 0.07
ATOM	292		ASP	16		1.081 12.01 0.71
ATOM	293		ASP	16		1.390 16.00 -0.72
ATOM	294		ASP	16		1.574 16.00 -0.72
ATOM	295	C	ASP	16		-1.247 12.01 0.62
ATOM	296		ASP			-2.133 16.00 -0.50
ATOM	297	N	LYS	17		-1.392 14.01 -0.46
ATOM	298		LYS	17		-0.651 1.01 0.25
ATOM	299		LYS	17		-2.625 12.01 0.03
ATOM	300		LYS	17		-3.467 1.01 0.05
ATOM	301		LYS	17		-2.745 12.01 -0.10
ATOM	302		LYS	17		-2.436 1.01 0.04
ATOM	303		LYS	17		-2.107 1.01 0.04
ATOM	304		LYS	17		-4.169 12.01 -0.16
ATOM	305		LYS	17		-4.626 1.01 0.12
ATOM	306		LYS	17		-4.760 1.01 0.12
ATOM	307		LYS	17		-4.198 12.01 -0.18
ATOM	308			17		-3.829 1.01 0.12
ATOM	309	HD2	LYS	17	14.436 -25.651	-5.244 1.01 0.12
ATOM	310	CE	LYS	17	14.960 -24.665	-3.411 12.01 -0.04
ATOM	311	HE1	LYS	17	15.978 -24.686	-3.804 1.01 0.10
ATOM	312	HE2	LYS	17	14.557 -23.662	-3.560 1.01 0.10
ATOM	313	NZ	LYS	17	15.041 -24.974	-1.967 14.01 -0.14
ATOM	314	HZ1	LYS	17	15.672 -24.324	-1.520 1.01 0.29
ATOM	315	HZ2	LYS	17	14.133 -24.894	-1.525 1.01 0.29
ATOM	316	HZ3	LYS	17	15.388 -25.913	-1.833 1.01 0.29
ATOM	317	C	LYS	17	10.176 -26.977	-2.657 12.01 0.62
ATOM	318	0	LYS	17	9.744 -27.480	-3.696 16.00 -0.50
ATOM	319	N	ASN	18	10.291 -27.669	-1.511 14.01 -0.46
ATOM	320	HN	ASN	18	10.646 -27.216	-0.670 1.01 0.25
ATOM	321	CA	ASN	18	9.899 -29.068	-1.398 12.01 0.03
ATOM	322	HA	ASN	18	10.494 -29.649	-2.105 1.01 0.05
ATOM	323	CB	ASN	18	10.209 -29.552	0.023 12.01 -0.09
ATOM	324		ASN	18	11.273 -29.421	0.214 1.01 0.04
ATOM	325		ASN	18	9.645 -28.955	
ATOM	326	CG	ASN	18	9.898 -31.029	0.228 12.01 0.68

```
941
                                                                942
ATOM
       327 OD1 ASN
                               10.076 -31.833 -0.683 16.00 -0.47
                       18
ATOM
            ND2 ASN
       328
                       18
                                9.455 - 31.390
                                                1.433 14.01 -0.87
                                                1.637 1.01 0.34
ATOM
       329 HD21 ASN
                       18
                                9.255 - 32.358
ATOM
       330 HD22 ASN
                        18
                                9.326 -30.704
                                                2.164 1.01 0.34
        331 C
                ASN
ATOM
                        18
                                 8.411 -29.226 -1.750 12.01 0.62
                ASN
ATOM
        332 0
                       18
                                 8.043 -30.093 -2.542 16.00 -0.50
        333 N
                LEU
ATOM
                        19
                                 7.559 -28.370 -1.174 14.01 -0.46
        334 HN
                LEU
ATOM
                        19
                                 7.931 -27.678 -0.538 1.01 0.25
                LEU
                        19
ATOM
        335 CA
                                 6.121 -28.353 -1.404 12.01 0.03
ATOM
            HA
                LEU
                                 5.732 -29.334 -1.131 1.01 0.05
        336
                       19
ATOM
        337
            CB LEU
                        19
                                 5.454 -27.292 -0.514 12.01 -0.06
ATOM
             HB1 LEU
                                 5.624 -27.557
                                                0.529 1.01 0.03
        338
                        19
ATOM
        339
             HB2 LEU
                        19
                                 5.919 -26.325 -0.707 1.01 0.03
ATOM
             CG
                LEU
                                 3.939 -27.149 -0.736 12.01 -0.01
        340
                        19
        341 HG LEU
ATOM
                        19
                                 3.743 -26.813 -1.754 1.01 0.03
ATOM
        342 CD1 LEU
                        19
                                 3.214 -28.479 -0.513 12.01 -0.11
        343 HD11 LEU
ATOM
                        19
                                 3.552 -28.925
                                                0.418 1.01 0.03
        344 HD12 LEU
                                 2.138 -28.314 -0.465 1.01 0.03
ATOM
                        19
ATOM
        345 HD13 LEU
                        19
                                 3.422 -29.166
                                               -1.331 1.01 0.03
ATOM
        346 CD2 LEU
                                 3.386 -26.092
                                                0.228 12.01 -0.11
                        19
ATOM
        347 HD21 LEU
                        19
                                 3.542 -26.407
                                                1.260 1.01 0.03
ATOM
        348 HD22 LEU
                                 3.893 -25.141
                                                 0.066 1.01 0.03
                        19
ATOM
        349 HD23 LEU
                        19
                                 2.318 -25.955
                                                 0.057 1.01 0.03
ATOM
        350 C
                 LEU
                        19
                                 5.828 -28.108 -2.881 12.01 0.62
             0
                 LEU
ATOM
        351
                        19
                                 5.045 -28.845 -3.471 16.00 -0.50
        352 N
                 ARG
                                 6.458 -27.091 -3.483 14.01 -0.46
ATOM
                        20
ATOM
        353 HN
                 ARG
                                 7.094 -26.521
                                               -2.940 1.01
                        20
                                                             0.25
                                               -4.894 12.01
             CA
                 ARG
                                 6.286 -26.767
ATOM
        354
                        20
                                                             0.03
ATOM
        355
             HA
                 ARG
                        20
                                 5.253 -26.462 -5.056 1.01 0.05
             CB
                ARG
                                 7.206 -25.598
                                               -5.279 12.01 -0.08
ATOM
        356
                        20
                                 6.889 - 24.713
ATOM
        357
             HB1 ARG
                        20
                                               -4.725 1.01
ATOM
             HB2 ARG
                                 8.236 -25.830 -5.008 1.01 0.06
        358
                        20
ATOM
        359
             CG ARG
                        20
                                 7.150 -25.304 -6.783 12.01 -0.10
ATOM
        360
             HG1 ARG
                                 7.613 -26.130 -7.326 1.01 0.07
             HG2 ARG
                                 6.109 -25.209
                                               -7.092 1.01
ATOM
        361
                        20
                                                             0.07
             CD ARG
                                 7.900 -24.013 -7.126 12.01 -0.23
ATOM
        362
             HD1 ARG
                                               -6.604 1.01
ATOM
        363
                        20
                                 7.416 -23.189
                                                              0.13
             HD2 ARG
                        20
                                 8.932 -24.096 -6.780 1.01 0.13
ATOM
        364
ATOM
        365
             NE ARG
                                 7.899 -23.780 -8.579 14.01 -0.32
                        20
ATOM
        366
             HE ARG
                        20
                                 7.738 -24.591
                                               -9.158 1.01
                                                             0.27
                                 8.118 -22.598 -9.182 12.01
ATOM
        367
             CZ ARG
                        20
                                                              0.76
ATOM
        368
             NH1 ARG
                        20
                                 8.096 -22.526 -10.519 14.01 -0.62
ATOM
        369 HH11 ARG
                        20
                                 8.253 -21.646 -10.990 1.01 0.36
ATOM
        370 HH12 ARG
                        20
                                 7.944 -23.355 -11.076 1.01 0.36
ATOM
        371 NH2 ARG
                                 8.356 -21.493 -8.463 14.01 -0.62
                        20
ATOM
        372 HH21 ARG
                        20
                                 8.513 -20.604 -8.914 1.01 0.36
ATOM
        373 HH22 ARG
                                 8.387 -21.544
                                               -7.455 1.01
ATOM
        374 C
                 ARG
                        20
                                 6.541 -28.012
                                               -5.743 12.01 0.62
             0
                 ARG
                                 5.746 -28.330 -6.628 16.00 -0.50
ATOM
        375
ATOM
        376 N
                 SER
                                 7.640 -28.720 -5.454 14.01 -0.46
```

	0.40				(413)				771#12
. TOW	943	TINT	CDD	01	0.047	00 000	4 707	1 01	944
ATOM	377	HN	SER	21		-28.399		1.01	0.25
ATOM	378	CA	SER	21		-29.948	-6.153		0.03
ATOM	379	HA	SER	21		-29.712	-7.212	1.01	0.05
ATOM	380	CB	SER	21		-30.489	-5.627		0.02
ATOM	381	HB1		21		-29.680	-5.586	1.01	0.12
ATOM	382	HB2		21		-30.903	-4.626	1.01	0.12
ATOM	383	OG	SER	21		-31.492	-6.490		
ATOM	384	HG	SER	21		-31.092	-7.352	1.01	0.31
ATOM	385	C	SER	21		-30.958	-5.988		0.62
ATOM	386	0	SER	21		-31.511	-6.973		
ATOM	387	N	GLY	22		-31.180	-4.741	14.01	-0.46
ATOM	388	HN	GLY	22		-30.682	-3.978	1.01	0.25
ATOM	389	CA	GLY	22	5.328	-32.088	-4.397	12.01	0.03
ATOM	390	HA1	GLY	22	5.652	-33.114	-4.572	1.01	0.03
ATOM	391	HA2	GLY	22	5.104	-31.967	-3.338	1.01	0.03
ATOM	392	C	GLY	22	4.056	-31.812	-5.200	12.01	0.62
ATOM	393	0	GLY	22	3.505	-32.729	-5.803	16.00	-0.50
ATOM	394	N	VAL	23	3.592	-30.557	-5.213	14.01	-0.46
ATOM	395	HN	VAL	23	4.100	-29.854	-4.695	1.01	0.25
ATOM	396	CA	VAL	23	2.397	-30.137	-5.933	12.01	0.03
ATOM	397	HA	VAL	23	1.552	-30.729	-5.579	1.01	0.05
ATOM	398	CB	VAL	23	2.096	-28.653	-5.652	12.01	-0.01
ATOM	399	HB	VAL	23	2.993	-28.055	-5.821	1.01	0.02
ATOM	400	CG1	VAL	23	0.983	-28.130	-6.571	12.01	-0.09
ATOM	401	HG11	VAL	23	0.137	-28.815	-6.553	1.01	0.03
ATOM	402	HG12	VAL	23	0.645	-27.152	-6.234	1.01	0.03
ATOM	403	HG13	VAL	23	1.344	-28.034	-7.595	1.01	0.03
ATOM	404	CG2	VAL	23	1.647	-28.469	-4.198	12.01	-0.09
ATOM	405	HG21	VAL	23	1.465	-27.413	-4.000	1.01	0.03
ATOM	406	HG22	VAL	23	0.728	-29.029	-4.021	1.01	0.03
ATOM	407	HG23	VAL	23	2.416	-28.822	-3.514	1.01	0.03
ATOM	408	С	VAL	23	2.554	-30.407	-7.427	12.01	0.62
ATOM	409	0	VAL	23	1.668	-30.987	-8.046	16.00	-0.50
ATOM	410	N	ARG	24	3.674	-29.988	-8.020	14.01	-0.46
ATOM	411	HN	ARG	24	4.381	-29.512	-7.471	1.01	0.25
ATOM	412	CA	ARG	24	3.912	-30.196	-9.442	12.01	0.03
ATOM	413	HA	ARG	24	3.054	-29.804	-9.992	1.01	0.05
ATOM	414	CB	ARG	24	5.144	-29.392	-9.876	12.01	-0.08
ATOM	415	HB1	ARG	24	5.922	-29.467	-9.116	1.01	0.06
ATOM	416	HB2	ARG	24	5.531	-29.787	-10.817	1.01	0.06
ATOM	417	CG	ARG	24	4.729	-27.929	-10.097	12.01	-0.10
ATOM	418	HG1	ARG	24	4.164	-27.882	-11.030	1.01	0.07
ATOM	419	HG2	ARG	24	4.079	-27.594	-9.286	1.01	0.07
ATOM	420	CD	ARG	24	5.933	-26.985	-10.165	12.01	-0.23
ATOM	421	HD1	ARG	24	6.161	-26.664	-9.149	1.01	0.13
ATOM	422	HD2	ARG	24	6.809	-27.513	-10.542	1.01	0.13
ATOM	423	NE	ARG	24	5.638	-25.800	-10.991	14.01	-0.32
ATOM	424	HE	ARG	24	5.225	-25.005	-10.524	1.01	0.27
ATOM	425	CZ	ARG	24	5.835	-25.732	-12.320	12.01	0.76
ATOM	426	NH1	ARG	24	5.571	-24.601	-12.985	14.01	-0.62

```
945
                                                               946
ATOM
       427 HH11 ARG
                       24
                                5.815 -24.552 -13.975 1.01 0.36
ATOM
       428 HH12 ARG
                       24
                                5.117 -23.807 -12.541 1.01 0.36
ATOM
       429 NH2 ARG
                       24
                                6.297 -26.798 -12.986 14.01 -0.62
ATOM
        430 HH21 ARG
                       24
                                6.402 -26.774 -13.999 1.01 0.36
ATOM
        431 HH22 ARG
                        24
                                6.453 -27.674 -12.512 1.01 0.36
ATOM
        432
           C
                ARG
                                3.998 -31.685 -9.805 12.01 0.62
                       24
ATOM
            0
        433
                ARG
                       24
                                3.636 -32.059 -10.918 16.00 -0.50
ATOM
        434 N
                LYS
                        25
                                4.465 -32.536 -8.884 14.01 -0.46
            HN
                LYS
                        25
ATOM
        435
                                4.753 -32.172 -7.983 1.01 0.25
ATOM
        436
            CA
                LYS
                        25
                                4.591 -33.971 -9.109 12.01 0.03
            HA LYS
ATOM
        437
                        25
                                4.935 -34.158 -10.127 1.01 0.05
            CB LYS
                        25
ATOM
        438
                                5.650 -34.542 -8.160 12.01 -0.10
ATOM
            HB1 LYS
                        25
        439
                                5.470 -34.174 -7.149 1.01 0.04
                                5.578 -35.631 -8.148 1.01 0.04
ATOM
        440 HB2 LYS
                        25
ATOM
        441 CG LYS
                        25
                                7.063 -34.168 -8.618 12.01 -0.16
        442 HG1 LYS
                        25
                                7.317 -34.755 -9.502 1.01 0.12
ATOM
ATOM
        443 HG2 LYS
                        25
                                7.109 -33.108 -8.874 1.01 0.12
ATOM
            CD LYS
                        25
                                8.051 -34.457 -7.487 12.01 -0.18
        444
ATOM
        445
           HD1 LYS
                        25
                                7.844 -33.768 -6.667 1.01 0.12
ATOM
        446
           HD2 LYS
                        25
                                7.908 -35.480 -7.136 1.01 0.12
ATOM
        447
            CE LYS
                        25
                                9.496 -34.282 -7.962 12.01 -0.04
ATOM
            HE1 LYS
                        25
                                9.768 -35.126 -8.599 1.01 0.10
        448
ATOM
        449
            HE2 LYS
                        25
                                9.587 -33.362 -8.540 1.01 0.10
                                10.420 -34.209 -6.817 14.01 -0.14
ATOM
        450 NZ LYS
                        25
ATOM
        451
            HZ1 LYS
                        25
                                10.260 -34.997 -6.202 1.01 0.29
        452 HZ2 LYS
                                11.376 -34.213 -7.139 1.01 0.29
ATOM
                        25
            HZ3 LYS
ATOM
        453
                        25
                                10.243 -33.345
                                               -6.315 1.01 0.29
        454 C
                 LYS
                                3.268 -34.720 -8.927 12.01 0.62
ATOM
                        25
ATOM
        455
            0
                 LYS
                        25
                                 2.808 -35.389
                                               -9.849 16.00 -0.50
ATOM
        456
            N
                 TYR
                        26
                                 2.681 -34.646 -7.727 14.01 -0.46
                TYR
ATOM
        457
            HN
                        26
                                 3.121 -34.087 -7.010 1.01 0.25
ATOM
        458
            CA
                 TYR
                        26
                                 1.466 -35.370 -7.361 12.01 0.03
             HA
                TYR
ATOM
        459
                        26
                                 1.371 -36.255 -7.990 1.01 0.05
             CB
                TYR
ATOM
        460
                        26
                                 1.605 -35.857 -5.911 12.01 -0.10
ATOM
             HB1 TYR
        461
                        26
                                 1.460 -34.993 -5.259 1.01
            HB2 TYR
ATOM
                        26
                                 0.809 -36.570 -5.705 1.01 0.04
        462
             CG TYR
ATOM
        463
                        26
                                 2.928 -36.516 -5.546 12.01 -0.03
             CD1 TYR
                        26
ATOM
        464
                                 3.638 -37.302 -6.476 12.01 0.00
             HD1 TYR
ATOM
                                 3.259 -37.457 -7.475 1.01 0.06
        465
                        26
ATOM
        466
             CE1 TYR
                        26
                                 4.860 -37.896 -6.113 12.01 -0.26
ATOM
            HE1 TYR
                                 5.394 -38.492 -6.839 1.01 0.10
        467
                        26
ATOM
        468
             CZ TYR
                        26
                                 5.376 -37.711 -4.819 12.01 0.46
             OH TYR
ATOM
        469
                        26
                                 6.560 -38.286 -4.461 16.00 -0.53
ATOM
        470
             HH TYR
                        26
                                 6.975 -38.778 -5.172 1.01 0.33
             CE2 TYR
ATOM
        471
                        26
                                 4.670 -36.931 -3.890 12.01 -0.26
ATOM
        472
             HE2 TYR
                        26
                                 5.061 -36.785 -2.895 1.01 0.10
ATOM
        473
             CD2 TYR
                                 3.451 -36.336 -4.254 12.01
                        26
                                                            0.00
             HD2 TYR
ATOM
        474
                        26
                                 2.915 -35.740 -3.537 1.01 0.06
             C
                 TYR
ATOM
        475
                        26
                                 0.167 -34.578 -7.545 12.01 0.62
ATOM
        476 0
                 TYR
                        26
                                -0.901 -35.094 -7.217 16.00 -0.50
```

```
947
                                                                948
ATOM
        477 N
                GLY
                        27
                                0.241 -33.348 -8.063 14.01 -0.46
ATOM
        478
            HN
                GLY
                        27
                                1.141 -32.959
                                              -8.312 1.01 0.25
ATOM
        479
            CA
                GLY
                        27
                               -0.917 -32.496 -8.290 12.01 0.03
ATOM
        480 HA1 GLY
                        27
                               -0.668 -31.781
                                              -9.074 1.01 0.03
ATOM
        481
            HA2 GLY
                        27
                               -1.765 -33.093 -8.630 1.01 0.03
ATOM
        482
           С
                 GLY
                        27
                               -1.316 -31.740 -7.023 12.01 0.62
ATOM
        483 0
                 GLY
                        27
                               -0.984 -32.149 -5.910 16.00 -0.50
ATOM
        484
            N
                 GLU
                        28
                               -2.042 -30.629 -7.198 14.01 -0.46
ATOM
        485 HN
                GLU
                        28
                               -2.290 -30.345 -8.133 1.01 0.25
ATOM
            CA
                GLU
                               -2.524 -29.820 -6.088 12.01 0.03
        486
                        28
ATOM
        487 HA
                GLU
                               -1.718 -29.716 -5.358 1.01 0.05
                        28
ATOM
        488
            CB GLU
                                -2.918 -28.420 -6.589 12.01 -0.18
                        28
ATOM
        489
            HB1 GLU
                        28
                                -2.190 -28.077 -7.326 1.01 0.09
            HB2 GLU
ATOM
        490
                        28
                                -3.902 -28.460 -7.062 1.01 0.09
             CG GLU
ATOM
        491
                        28
                                -2.932 -27.403 -5.441 12.01 -0.40
            HG1 GLU
ATOM
        492
                        28
                                -3.600 -27.745 -4.652 1.01 0.07
             HG2 GLU
ATOM
        493
                        28
                                -1.924 -27.311 -5.037 1.01 0.07
ATOM
             CD
                GLU
        494
                        28
                                -3.401 -26.023 -5.882 12.01 0.71
            OE1 GLU
ATOM
        495
                        28
                                -2.728 -25.413 -6.745 16.00 -0.72
             OE2 GLU
ATOM
        496
                        28
                                -4.412 -25.546 -5.322 16.00 -0.72
             С
                 GLU
ATOM
        497
                        28
                                -3.698 -30.558 -5.437 12.01 0.62
ATOM
                 GLU
        498
             0
                        28
                                -4.378 -31.345 -6.096 16.00 -0.50
            N
                 GLY
ATOM
        499
                        29
                                -3.934 -30.318 -4.145 14.01 -0.46
             HN
                GLY
ATOM
        500
                        29
                                -3.348 -29.664 -3.647 1.01 0.25
             CA GLY
                                -5.010 -30.971 -3.417 12.01 0.03
ATOM
        501
                        29
             HA1 GLY
ATOM
        502
                        29
                                -5.098 -30.505 -2.442 1.01
            HA2 GLY
ATOM
        503
                        29
                                -5.952 -30.858 -3.955 1.01
ATOM
        504 C
                 GLY
                        29
                                -4.700 -32.448 -3.201 12.01 0.62
ATOM
        505
            0
                 GLY
                        29
                                -5.561 -33.306 -3.386 16.00 -0.50
ATOM
        506 N
                 ASN
                        30
                                -3.454 -32.731 -2.809 14.01 -0.46
ATOM
        507 HN
                 ASN
                        30
                                -2.810 -31.964 -2.684 1.01 0.25
ATOM
        508
            CA
                 ASN
                        .30
                                -2.951 -34.073 -2.550 12.01 0.03
ATOM
        509
             HA
                 ASN
                        30
                                -3.764 -34.693 -2.167 1.01 0.05
             CB ASN
ATOM
        510
                        30
                                -2.430 -34.651 -3.875 12.01 -0.09
ATOM
        511
             HB1 ASN
                        30
                                -3.158 -34.440 -4.661 1.01 0.04
                                -1.490 -34.167 -4.142 1.01 0.04
ATOM
        512 HB2 ASN
                        30
ATOM
        513
             CG ASN
                        30
                                -2.234 -36.162 -3.843 12.01 0.68
             OD1 ASN
ATOM
        514
                        30
                                -2.475 -36.820 -2.834 16.00 -0.47
ATOM
        515
            ND2 ASN
                        30
                                -1.809 -36.727 -4.972 14.01 -0.87
        516 HD21 ASN
ATOM
                        30
                                -1.712 -37.729
                                               -5.018 1.01 0.34
        517 HD22 ASN
ATOM
                        30
                                -1.618 -36.148 -5.785 1.01 0.34
                 ASN
ATOM
        518 C
                        30
                                -1.862 -33.970 -1.478 12.01 0.62
                 ASN
ATOM
        519
             0
                                -0.801 -34.592 -1.570 16.00 -0.50
                        30
ATOM
        520 N
                 TRP
                        31
                                -2.135 -33.143 -0.462 14.01 -0.46
ATOM
        521
             HN
                 TRP
                        31
                                -3.030 -32.677 -0.467 1.01 0.25
ATOM
        522
             CA
                 TRP
                        31
                                -1.230 -32.852
                                                 0.641 12.01 0.03
                 TRP
ATOM
        523
             HA
                        31
                                -0.315 -32.470
                                                 0.192 1.01 0.05
ATOM
        524
             CB
                 TRP
                        31
                                -1.769 -31.712
                                                 1.519 12.01 -0.10
             HB1 TRP
ATOM
        525
                                -2.356 -32.112
                                                 2.340 1.01 0.04
ATOM
        526
             HB2 TRP
                                -0.921 -31.193
                                                 1.960 1.01 0.04
```

					(4/0)	付用るし
	949					950
ATOM	527	CG '	TRP	31	-2.596 -30.717	0.766 12.01 -0.14
ATOM	528	CD1	TRP	31	-3.944 -30.636	0.793 12.01 0.04
ATOM	529	HD1	TRP	31	-4.595 -31.271	1.372 1.01 0.09
ATOM	530	NE1	TRP	31	-4.366 -29.627	-0.045 14.01 -0.35
ATOM	531	HE1	TRP	31	-5.330 -29.352	-0.228 1.01 0.27
ATOM	532	CE2	TRP	31	-3.300 -29.001	-0.650 12.01 0.15
ATOM	533	CZ2	TRP	31	-3.212 -27.944	-1.565 12.01 -0.17
ATOM	534	HZ2		31	-4.106 -27.458	
ATOM	535	CH2	TRP	31	-1.947 -27.532	-2.004 12.01 -0.08
ATOM	536	нн2		31	-1.867 -26.738	-2.723 1.01 0.07
ATOM	537	CZ3		31	-0.791 -28.173	-1.528 12.01 -0.07
ATOM	538	HZ3		31	0.179 -27.848	-1.871 1.01 0.06
ATOM	539	CE3		31	-0.893 -29.236	-0.612 12.01 -0.17
ATOM	540	HE3		31	0.004 -29.722	-0.259 1.01 0.09
ATOM	541	CD2		31	-2.151 -29.675	-0.148 12.01 0.15
ATOM	542		TRP	31	-0.866 -34.111	
ATOM	543		TRP	31		2.010 16.00 -0.50
ATOM	544		SER	32	-1.734 -35.129	
ATOM	545		SER	32	-2.607 -35.029	0.907 1.01 0.25
ATOM	546		SER	32	-1.485 -36.395	2.082 12.01 0.03
ATOM	547		SER	32	-1.259 -36.211	3.134 1.01 0.05
ATOM	548		SER	32	-2.735 -37.279	
ATOM	549	HB1		32	-2.493 -38.278	2.368 1.01 0.12
ATOM	550	HB2		32	-3.515 -36.858	2.635 1.01 0.12
ATOM	551		SER	32	-3.214 -37.367	0.672 16.00 -0.55
ATOM	552		SER	32	-3.706 -36.560	0.461 1.01 0.31
ATOM	553		SER	32	-0.279 -37.068	1.425 12.01 0.62
ATOM	554		SER	32	0.746 -37.281	2.070 16.00 -0.50
ATOM	555		LYS	33	-0.400 -37.393	0.133 14.01 -0.46
ATOM	556		LYS	33	-1.278 -37.183	-0.329 1.01 0.25
ATOM	557		LYS	33	0.662 -38.029	-0.630 12.01 0.03
ATOM	558		LYS	33	0.848 -39.004	-0.176 1.01 0.05
ATOM		СВ		33		-2.077 12.01 -0.10
ATOM		HB1		33		-2.058 1.01 0.04
ATOM	561	HB2		33		-2.577 1.01 0.04
ATOM	562	CG		33		-2.852 12.01 -0.16
ATOM	563	HG1		33	2.101 -38.477	
ATOM	564	HG2		33	1.518 -39.952	
ATOM	565	CD		33	0.647 -39.580	
ATOM	566	HD1		33	-0.218 -40.220	
ATOM	567	HD2		33	0.315 -38.712	-4.754 1.01 0.12
ATOM	568		LYS	33	1.685 -40.338	
ATOM	569	HE1		33	1.227 -40.609	
ATOM	570	HE2		33	2.539 -39.689	-5.222 1.01 0.10
ATOM	571	NZ	LYS	33	2.161 -41.569	
ATOM	572			33		-3.537 1.01 0.29
ATOM	573			33	1.377 -42.146	
ATOM	574			33	2.751 -42.087	
ATOM	575		LYS	33	1.947 -37.203	
ATOM	576			33		-0.302 16.00 -0.50
AIUM	510	U	LIO	33	2.010 -21.103	0.302 10.00 -0.30

```
951
                                                                952
ATOM
        577 N
                        34
                ILE
                                 1.838 -35.879 -0.723 14.01 -0.46
ATOM
        578
            HN
                ILE
                        34
                                 0.925 - 35.478
                                               -0.914 1.01 0.25
            CA
                 ILE
ATOM
        579
                        34
                                 2.985 -34.983
                                               -0.633 12.01 0.03
                 ILE
ATOM
        580
            HA
                        34
                                 3.709 -35.267 -1.397 1.01 0.05
                 ILE
ATOM
        581
            CB
                        34
                                 2.573 -33.521 -0.896 12.01 -0.01
            HB
                ILE
ATOM
        582
                        34
                                 1.751 -33.267 -0.230 1.01 0.02
ATOM
        583 CG2 ILE
                        34
                                 3.746 -32.573 -0.602 12.01 -0.08
        584 HG21 ILE
ATOM
                        34
                                 4.616 -32.859 -1.194 1.01 0.03
ATOM
        585 HG22 ILE
                                 3.476 -31.545 -0.833 1.01 0.03
                        34
ATOM
        586 HG23 ILE
                        34
                                 4.010 -32.613
                                                 0.452 1.01 0.03
ATOM
        587 CG1 ILE
                        34
                                 2.121 -33.350 -2.359 12.01 -0.05
ATOM
        588 HG11 ILE
                        34
                                 2.987 -33.423 -3.016 1.01 0.03
ATOM
        589 HG12 ILE
                        34
                                 1.428 -34.144
                                               -2.627 1.01 0.03
ATOM
        590 CD1 ILE
                        34
                                 1.404 -32.023 -2.626 12.01 -0.08
ATOM
        591 HD1 ILE
                                 1.004 -32.038 -3.640 1.01 0.03
                        34
        592 HD2 ILE
ATOM
                        34
                                 0.578 -31.893
                                               -1.928 1.01 0.03
        593 HD3 ILE
ATOM
                        34
                                 2.092 -31.183 -2.536 1.01 0.03
ATOM
        594 C
                 ILE
                        34
                                 3.664 -35.176
                                                 0.725 12.01 0.62
            0
ATOM
        595
                 ILE
                        34
                                 4.847 -35.493
                                                 0.764 16.00 -0.50
ATOM
        596 N
                 LEU
                        35
                                 2.926 -35.004
                                                 1.826 14.01 -0.46
                LEU
                                 1.953 -34.750
ATOM
        597 HN
                        35
                                                 1.717 1.01 0.25
ATOM
        598 CA
                 LEU
                        35
                                 3.424 -35.158
                                                 3.188 12.01 0.03
ATOM
        599 HA
                 LEU
                        35
                                 4.158 -34.372
                                                 3.360 1.01 0.05
ATOM
        600
            CB
                 LEU
                        35
                                 2.260 -34.957
                                                 4.174 12.01 -0.06
ATOM
        601
             HB1 LEU
                        35
                                 1.869 -33.949
                                                 4.044 1.01 0.03
            HB2 LEU
ATOM
        602
                        35
                                 1.469 -35.664
                                                 3.925 1.01 0.03
             CG
                 LEU
                        35
ATOM
        603
                                 2.609 - 35.157
                                                 5.659 12.01 -0.01
ATOM
        604
             HG
                 LEU
                        35
                                 2.963 -36.176
                                                 5.822 1.01 0.03
ATOM
        605 CD1 LEU
                        35
                                 3.680 -34.174
                                                 6.140 12.01 -0.11
ATOM
        606 HD11 LEU
                        35
                                 3.350 -33.151
                                                 5.962 1.01 0.03
ATOM
        607 HD12 LEU
                        35
                                 3.850 -34.310
                                                 7.209 1.01 0.03
ATOM
        608 HD13 LEU
                                 4.619 -34.349
                        35
                                                 5.618 1.01 0.03
ATOM
        609 CD2 LEU
                        35
                                 1.340 -34.960
                                                 6.496\ 12.01\ -0.11
ATOM
        610 HD21 LEU
                        35
                                 0.574 -35.669
                                                 6.181 1.01 0.03
ATOM
        611 HD22 LEU
                        35
                                 1.562 -35.129
                                                 7.550 1.01 0.03
ATOM
        612 HD23 LEU
                        35
                                 0.961 - 33.945
                                                 6.370 1.01 0.03
ATOM
        613 C
                 LEU
                        35
                                 4.111 -36.509
                                                 3.400 12.01 0.62
ATOM
        614 0
                 LEU
                        35
                                 5.167 -36.565
                                                 4.026 16.00 -0.50
ATOM
        615 N
                 LEU
                        36
                                 3.518 - 37.599
                                                 2.897 14.01 -0.46
        616 HN
                 LEU
ATOM
                        36
                                 2.645 -37.494
                                                 2.392 1.01 0.25
                 LEU
ATOM
        617 CA
                        36
                                  4.065 -38.939
                                                 3.061 12.01 0.03
                 LEU
ATOM
        618
            HA
                        36
                                 4.171 -39.122
                                                 4.130 1.01 0.05
ATOM
                 LEU
        619
             CB
                        36
                                 3.108 -39.997
                                                 2.480 12.01 -0.06
ATOM
             HB1 LEU
        620
                        36
                                 2.487 - 39.563
                                                 1.696 1.01 0.03
ATOM
        621
             HB2 LEU
                                 3.705 -40.792
                        36
                                                 2.031 1.01 0.03
ATOM
        622
             CG LEU
                        36
                                 2.222 -40.656
                                                 3.552 12.01 -0.01
ATOM
             HG LEU
                                  2.866 -41.072
        623
                        36
                                                  4.329 1.01 0.03
ATOM
        624
             CD1 LEU
                        36
                                  1.240 -39.677
                                                  4.206 12.01 -0.11
                                                  4.621 1.01 0.03
ATOM
        625 HD11 LEU
                                  1.766 -38.818
                         36
ATOM
        626 HD12 LEU
                                  0.509 - 39.339
                                                  3.474 1.01 0.03
```

				(410)	NIMI Z O C
	953				954
ATOM	627 HD13		36	0.711 -40.182	
ATOM		LEU	36	1.432 -41.808	
ATOM	629 HD21		36	2.119 -42.547	2.507 1.01 0.03
ATOM	630 HD22	LEU	36	0.814 -42.290	3.680 1.01 0.03
ATOM	631 HD23	LEU	36	0.790 -41.430	2.125 1.01 0.03
ATOM	632 C	LEU	36	5.470 -39.072	2.470 12.01 0.62
ATOM	633 0	LEU	36	6.404 -39.422	3.191 16.00 -0.50
ATOM	634 N	HIS	37	5.627 -38.815	1.167 14.01 -0.46
ATOM	635 HN	HIS	37	4.822 -38.532	0.620 1.01 0.25
ATOM	636 CA	HIS	37	6.923 -38.944	0.509 12.01 0.03
ATOM	637 HA	HIS	37	7.381 -39.889	0.806 1.01 0.05
ATOM	638 CB	HIS	37	6.744 -38.969	-1.012 12.01 -0.10
ATOM	639 HB1	HIS	37	6.328 -38.015	-1.337 1.01 0.04
ATOM	640 HB2	HIS	37	7.722 -39.088	-1.481 1.01 0.04
ATOM	641 CG	HIS	37	5.843 -40.069	-1.506 12.01 -0.03
ATOM	642 ND1	HIS	37	6.211 -41.405	-1.514 14.01 -0.15
ATOM		HIS	37	7.093 -41.785	-1.201 1.01 0.23
ATOM		HIS	37	5.175 -42.099	-2.017 12.01 0.24
ATOM		HIS	37		-2.141 1.01 0.04
ATOM		HIS	37		-2.347 14.01 -0.50
ATOM		HIS	37	4.572 -40.043	
ATOM		HIS	37	3.998 -39.143	-2.146 1.01 0.02
ATOM	649 C	HIS	37	7.867 -37.806	
ATOM	650 0	HIS	37		1.247 16.00 -0.50
ATOM	651 N	TYR	38	7.364 -36.575	0.797 14.01 -0.46
ATOM	652 HN	TYR	38	6.401 -36.480	0.500 1.01 0.25
ATOM	653 CA	TYR	38	8.079 -35.341	1.066 12.01 0.03
ATOM	654 HA	TYR	38	9.149 -35.531	1.156 1.01 0.05
ATOM	655 CB	TYR	38	7.856 -34.384	
ATOM		l TYR	38	6.801 -34.119	
ATOM		2 TYR	38		0.082 1.01 0.04
ATOM	658 CG		38	8.294 -34.922	
ATOM		l TYR	38	7.431 -34.833	-2.574 12.01 0.00
ATOM		1 TYR	38	6.455 -34.382	-2.471 1.01 0.06
ATOM		1 TYR	38	7.837 -35.332	-3.825 12.01 -0.26
ATOM		1 TYR	38	7.170 -35.260	-4.671 1.01 0.10
ATOM	663 CZ	TYR	38	9.103 -35.923	-3.969 12.01 0.46
ATOM	664 OH	TYR	38	9.503 -36.411	-5.179 16.00 -0.53
ATOM	665 HH		38	10.231 -37.032	-5.092 1.01 0.33
ATOM		2 TYR	38	9.966 -36.013	-2.865 12.01 -0.26
ATOM		2 TYR	38	10.942 -36.465	-2.967 1.01 0.10
ATOM		2 TYR	38	9.563 -35.512	-1.617 12.01 0.00
ATOM		2 TYR	38	10.242 -35.589	-0.781 1.01 0.06
ATOM	670 C	TYR	38	7.608 -34.747	2.389 12.01 0.62
ATOM	671 0	TYR	38	6.671 -33.957	2.429 16.00 -0.50
ATOM	672 N	LYS	39	8.278 -35.136	3.476 14.01 -0.46
ATOM	673 HN		39	9.041 -35.787	3.366 1.01 0.25
ATOM	674 CA		39	7.970 -34.666	4.817 12.01 0.03
ATOM	675 HA		39	6.888 -34.675	4.949 1.01 0.05
ATOM	676 CB		39	8.579 -35.633	5.842 12.01 -0.10
VIOW	OLO CD	LIO	JJ	0.019 00.000	0.042 12.01 0.10

	955				(110)	956
ATOM	677	HB1	24.1	39	9.654 -35.708	
ATOM	678	HB2		39	8.401 -35.260	
ATOM	679		LYS	39	7.926 -37.016	
ATOM	680	HG1		39	6.863 -36.926	
ATOM	681	HG2		39	8.033 -37.381	
ATOM	682	CD		39	8.552 -38.039	
ATOM	683	HD1		39	9.624 ~38.101	
ATOM	684	HD2		39	8.393 -37.715	
ATOM	685		LYS	39	7.898 -39.407	
ATOM	686	HE1		39	6.822 -39.327	
ATOM	687	HE2		39	8.069 -39.715	
ATOM	688	NZ	LYS	39	8.444 -40.440	7.315 14.01 -0.14
ATOM	689	HZ1	LYS	39	8.275 -40.184	
ATOM	690	HZ2	LYS	39	7.992 -41.323	7.123 1.01 0.29
ATOM	691	HZ3	LYS	39	9.438 -40.537	7.162 1.01 0.29
ATOM	692	C	LYS	39	8.443 -33.221	5.011 12.01 0.62
ATOM	693	0	LYS	39	9.176 -32.681	4.182 16.00 -0.50
ATOM	694	N	PHE	40	8.002 -32.606	6.113 14.01 -0.46
ATOM	695	HN	PHE	40	7.405 -33.122	6.742 1.01 0.25
ATOM	696	CA	PHE	40	8.304 -31.231	6.495 12.01 0.03
ATOM	697	HA	PHE	40	9.168 -30.862	5.940 1.01 0.05
ATOM	698	CB	PHE	40	7.088 -30.356	6.165 12.01 -0.10
ATOM	699	HB1	PHE	40-	6.253 -30.666	6.793 1.01 0.11
ATOM	700	HB2	PHE	40	7.317 -29.319	6.403 1.01 0.11
ATOM	701	CG	PHE	40	6.669 -30.417	
ATOM	702	CD1	PHE	40	5.678 -31.325	
ATOM	703		PHE	40	5.208 -31.979	
ATOM	704		PHE	40	5.296 -31.386	
ATOM	705		PHE	40	4.536 -32.086	
ATOM	706	CZ	PHE	40	5.903 -30.539	
ATOM	707	HZ	PHE	40	5.614 -30.581	
ATOM	708		PHE	40	6.893 -29.633	
ATOM	709		PHE	40	7.359 -28.987	
ATOM	710		PHE	40	7.277 -29.572	
ATOM	711		PHE	40	8.040 -28.877	
ATOM	712	С	PHE	40	8.647 -31.194	
ATOM	713	0	PHE	40	8.662 -32.241	
ATOM	714	N	ASN	41	8.922 -30.006	
ATOM	715	HN	ASN	41	8.894 -29.162	
ATOM	716	CA	ASN	41	9.267 -29.875	
ATOM	717	HA	ASN	41	10.083 -30.566	
ATOM	718	CB	ASN	41	9.765 -28.459	
ATOM	719		ASN	41	9.044 -27.711	
ATOM	720		ASN	41	9.863 -28.372	
ATOM	721	CG	ASN	41	11.137 -28.180	
ATOM	722		ASN	41	12.158 -28.338	
ATOM	723		ASN	41	11.161 -27.762	
ATOM		HD21		41	12.041 -27.581	
ATOM		HD22		41	10.281 -27.632	
ATOM	726		ASN	41	8.074 -30.268	
AIUM	120	C	NON	41	0.014 30.200	, 10.020 12.01 0.02

	0.55				(400)	1/11/11/2
	957	_				958
ATOM	727		ASN	41	8.170 -31.201	11.622 16.00 -0.50
ATOM	728	N	ASN	42	6.948 -29.561	10.677 14.01 -0.46
ATOM	729		ASN	42	6.940 -28.808	10.003 1.01 0.25
ATOM	730		ASN	42	5.723 -29.822	11.426 12.01 0.03
ATOM	731		ASN	42	5.543 -30.899	11.443 1.01 0.05
ATOM	732	CB	ASN	42	5.874 -29.331	12.878 12.01 -0.09
ATOM	733	HB1	ASN	42	6.814 -29.703	13.288 1.01 0.04
ATOM	734	HB2	ASN	42	5.907 -28.242	12.908 1.01 0.04
ATOM	735	CG	ASN	42	4.756 -29.840	13.787 12.01 0.68
MOTA	736	0D1	ASN	42	4.956 -30.777	14.556 16.00 -0.47
ATOM	737	ND2	ASN	42	3.575 -29.227	13.718 14.01 -0.87
ATOM	738	HD21	ASN	42	2.820 -29.520	14.319 1.01 0.34
ATOM	739	HD22	ASN	42	3.446 -28.479	13.046 1.01 0.34
ATOM	740	С	ASN	42	4.562 -29.153	10.689 12.01 0.62
ATOM	741	0	ASN	42	3.960 -28.207	11.195 16.00 -0.50
ATOM	742	N	ARG	43	4.265 -29.639	9.477 14.01 -0.46
ATOM	743	HN	ARG	43	4.802 -30.415	9.120 1.01 0.25
ATOM	744	CA	ARG	43	3.213 -29.109	
ATOM	745	HA	ARG	43	2.714 -28.271	
ATOM	746	СВ	ARG	43	3.819 -28.580	
ATOM	747		ARG	43	4.142 -29.425	6.700 1.01 0.06
ATOM	748		ARG	43	3.048 -28.043	6.756 1.01 0.06
ATOM	749	CG	ARG	43	5.030 -27.657	
ATOM	750		ARG	43	5.845 -28.203	7.980 1.01 0.07
ATOM	751		ARG	43	5.371 -27.357	6.514 1.01 0.07
ATOM	752	CD	ARG	43	4.739 -26.393	8.325 12.01 -0.23
ATOM	753		ARG	43	3.834 -25.911	7.959 1.01 0.13
ATOM	754		ARG	43	4.597 -26.640	9.374 1.01 0.13
ATOM	755	NE	ARG	43	5.871 -25.469	
ATOM	756		ARG	43	6.692 -25.806	7.714 1.01 0.27
ATOM	757		ARG	43	5.913 -24.191	8.609 12.01 0.76
ATOM	758		ARG	43	6.995 -23.465	8.321 14.01 -0.62
ATOM		НН11		43	7.040 -22.487	8.582 1.01 0.36
ATOM		HH12		43	7.735 -23.901	7.771 1.01 0.36
ATOM	761		ARG	43	4.906 -23.612	9.268 14.01 -0.62
ATOM		HH21		43	5.011 -22.639	9.533 1.01 0.36
ATOM		НН22		43	4.057 -24.086	9.573 1.01 0.36
ATOM	764		ARG	43	2.179 -30.199	8.330 12.01 0.62
ATOM	765		ARG	43	2.519 -31.243	7.778 16.00 -0.50
ATOM	766		THR	44	0.920 -29.949	8.701 14.01 -0.46
ATOM	767		THR	44	0.709 -29.069	9.147 1.01 0.25
ATOM	768		THR	44	-0.204 -30.852	8.498 12.01 0.03
ATOM	769		THR	44	0.123 -31.891	8.560 1.01 0.05
ATOM	770		THR		-1.251 -30.574	9.589 12.01 0.17
ATOM	771		THR	44	-2.064 -31.297	9.500 1.01 0.08
ATOM	772		THR		-0.664 -30.703	11.000 12.01 -0.19
ATOM		HG21			-0.202 -31.684	11.117 1.01 0.07
ATOM		HG22			0.084 -29.931	11.117 1.01 0.07
		HG23			-1.461 -30.599	
ATOM						
ATOM	776	061	THR	44	-1.782 -29.272	9.407 16.00 -0.55

					(101)	. 111112
	959					960
ATOM	777	HG1		44	-2.389 -29.086	
ATOM	778	C	THR	44	-0.838 -30.587	
ATOM	779		THR	44	-0.418 -29.675	
ATOM	780	N	SER	45	-1.881 -31.351	6.779 14.01 -0.46
ATOM	781	HN	SER	45	-2.190 -32.076	7.409 1.01 0.25
ATOM	782	CA	SER	45	-2.635 -31.156	5.544 12.01 0.03
ATOM	783	HA	SER	45	-1.991 -31.342	4.684 1.01 0.05
MOTA	784	CB	SER	45	-3.811 -32.143	5.508 12.01 0.02
ATOM	785	HB1	SER	45	-3.439 -33.167	5.436 1.01 0.12
ATOM	786	HB2	SER	45	-4.404 -32.045	6.418 1.01 0.12
ATOM	787	OG	SER	45	-4.654 -31.881	4.406 16.00 -0.55
ATOM	788	HG	SER	45	-4.379 -32.443	3.666 1.01 0.31
ATOM	789	C	SER	45	-3.133 -29.706	5.501 12.01 0.62
ATOM	790	0	SER	45	-3.049 -29.036	4.471 16.00 -0.50
ATOM	791	N	VAL	46	-3.635 -29.223	6.647 14.01 -0.46
ATOM	792	HN	VAL	46	-3.660 -29.830	7.452 1.01 0.25
ATOM	793	CA	VAL	46	-4.132 -27.868	6.806 12.01 0.03
ATOM	794	HA	VAL	46	-4.912 -27.708	6.060 1.01 0.05
ATOM	795	СВ	VAL	46	-4.755 -27.667	8.202 12.01 -0.01
ATOM	796	HB	VAL	46	-3.979 -27.747	8.964 1.01 0.02
ATOM	797		VAL	46	-5.402 -26.281	8.301 12.01 -0.09
ATOM		HG11		46	-4.657 -25.503	8.157 1.01 0.03
ATOM		HG12		46	-6.179 -26.173	7.543 1.01 0.03
ATOM		HG13		46	-5.851 -26.160	9.287 1.01 0.03
ATOM	801		VAL	46	-5.845 -28.700	8.512 12.01 -0.09
ATOM		HG21		46	-5.445 -29.713	8.486 1.01 0.03
ATOM		HG22		46	-6.248 -28.519	9.509 1.01 0.03
ATOM		HG23		46	-6.652 -28.603	7.786 1.01 0.03
ATOM	805	С	VAL	46	-2.998 -26.872	6.547 12.01 0.62
ATOM	806	0	VAL	46	-3.178 -25.957	
ATOM	807	N	MET	47	-1.841 -27.034	7.210 14.01 -0.46
ATOM	808	HN	MET	47	-1.742 -27.808	7.861 1.01 0.25
ATOM	809	CA	MET	47	-0.713 -26.119	7.022 12.01 0.03
ATOM	810	НА	MET	47	-1.027 -25.101	7.250 1.01 0.05
ATOM	811	СВ	MET	47	0.460 -26.469	
ATOM	812		MET	47	0.813 -27.468	7.694 1.01 0.03
ATOM	813		MET	47	1.265 -25.764	7.737 1.01 0.03
ATOM	814		MET	47	0.186 -26.396	9.455 12.01 -0.05
ATOM	815		MET	47	-0.483 -27.194	9.761 1.01 0.07
ATOM	816		MET	47	1.144 -26.563	9.948 1.01 0.07
ATOM	817	SD	MET	47	-0.448 -24.835	10.127 32.06 0.74
ATOM	818		MET	47	-0.432 -25.020	10.778 1.00 -0.38
ATOM	819		MET	47	-0.347 -24.464	9.566 1.00 -0.38
ATOM	820		MET	47	-2.226 -25.073	9.892 12.01 -0.13
ATOM	821		MET	47	-2.744 -24.212	10.291 1.01 0.07
ATOM	822		MET	47	-2.479 -25.149	8.843 1.01 0.07
ATOM	823		MET	47	-2.551 -25.969	10.421 1.01 0.07
ATOM	824		MET	47	-0.244 -26.096	5.566 12.01 0.62
ATOM	825		MET	47		5.033 16.00 -0.50
ATOM	826		LEU	48		4.925 14.01 -0.46

	961				,,	962
ATOM	827	HN	LEU	48	-0.441 -28.103	5.425 1.01 0.25
ATOM	828	CA	LEU	48	0.246 -27.404	3.542 12.01 0.03
ATOM	829	HA	LEU	48	1.237 -26.962	3.444 1.01 0.05
ATOM	830	CB	LEU	48	0.314 -28.896	3.175 12.01 -0.06
ATOM	831	HB1		48	-0.614 -29.373	3.489 1.01 0.03
ATOM	832	HB2		48	0.412 -29.007	2.095 1.01 0.03
ATOM	833	CG	LEU	48	1.507 -29.583	3.858 12.01 -0.01
ATOM	834	HG	LEU	48	1.631 -29.184	4.865 1.01 0.03
ATOM	835	CD1		48	1.309 -31.098	3.967 12.01 -0.11
ATOM		HD11		48	1.223 -31.544	2.976 1.01 0.03
ATOM		HD12		48	2.167 -31.533	4.479 1.01 0.03
ATOM		НД13		48	0.410 -31.326	4.536 1.01 0.03
ATOM	839		LEU	48	2.790 -29.325	3.067 12.01 -0.11
ATOM		HD21		48	2.803 -28.321	2.652 1.01 0.03
ATOM		HD22		48	3.644 -29.443	3.731 1.01 0.03
ATOM		HD23		48	2.861 -30.038	2.247 1.01 0.03
ATOM	843	C	LEU	48	-0.691 -26.630	2.616 12.01 0.62
ATOM	844	0	LEU	48	-0.233 -25.801	1.830 16.00 -0.50
ATOM	845	N	LYS	49	-2.001 -26.888	2.709 14.01 -0.46
ATOM	846	HN	LYS	49	-2.333 -27.578	
ATOM	847	CA	LYS	49	-2.971 -26.201	1.870 12.01 0.03
ATOM	848	НА	LYS	49	-2.668 -26.371	0.836 1.01 0.05
ATOM	849	СВ	LYS	49	-4.375 -26.787	2.065 12.01 -0.10
ATOM	850		LYS	49	-4.300 -27.875	2.075 1.01 0.04
ATOM	851		LYS	49	-4.790 -26.471	3.023 1.01 0.04
ATOM	852	CG	LYS	49	-5.288 -26.375	0.898 12.01 -0.16
ATOM	853		LYS	49	-4.739 -25.811	0.142 1.01 0.12
ATOM	854		LYS	49	-5.652 -27.285	0.419 1.01 0.12
ATOM	855		LYS	49	-6.526 -25.574	1.308 12.01 -0.18
ATOM	856		LYS	49	-7.117 -25.457	0.398 1.01 0.12
ATOM	857		LYS	49	-7.092 -26.147	2.042 1.01 0.12
ATOM	858		LYS	49	-6.231 -24.177	
ATOM	859		LYS	49	-5.733 -24.253	2.826 1.01 0.10
ATOM	860		LYS	49	-5.585 -23.649	1.158 1.01 0.10
ATOM	861	NZ	LYS	49	-7.471 -23.394	2.022 14.01 -0.14
ATOM	862	HZ1	LYS	49	-8.082 -23.821	2.707 1.01 0.29
ATOM	863	HZ2	LYS	49	-7.249 -22.458	2.321 1.01 0.29
ATOM	864	HZ3	LYS	49	-7.966 -23.342	1.132 1.01 0.29
ATOM	865	C	LYS	49	-2.967 -24.697	2.142 12.01 0.62
ATOM	866	0	LYS	49	-2.951 -23.903	1.204 16.00 -0.50
ATOM	867	N	ASP	50	-2.990 -24.304	3.420 14.01 -0.46
ATOM	868	HN	ASP	50	-3.003 -25.009	4.146 1.01 0.25
ATOM	869	CA	ASP	50	-2.991 -22.909	3.834 12.01 0.03
ATOM	870	HA	ASP	50	-3.897 -22.436	3.452 1.01 0.05
ATOM	871	CB	ASP	50	-3.009 -22.810	5.359 12.01 -0.40
ATOM	872	HB1	ASP	50	-3.914 -23.276	5.749 1.01 0.07
ATOM	873	HB2	ASP	50	-2.140 -23.321	5.776 1.01 0.07
ATOM	874	CG	ASP	50	-2.976 -21.351	5.785 12.01 0.71
ATOM	875	OD1	ASP	50	-4.060 -20.729	5.734 16.00 -0.72
ATOM	876	OD2	ASP	50	-1.880 -20.883	6.154 16.00 -0.72

```
963
                                                                 964
ATOM
        877 C
                 ASP
                        50
                                -1.778 -22.182
                                                  3.260 12.01 0.62
                                                  2.682 16.00 -0.50
ATOM
           0
                 ASP
        878
                        50
                                -1.911 -21.104
ATOM
        879 N
                 ARG
                        51
                                -0.593 - 22.781
                                                  3.403 14.01 -0.46
ATOM
        880 HN
                 ARG
                                -0.530 -23.669
                                                  3.883 1.01 0.25
                        51
                 ARG
                                 0.614 - 22.186
                                                  2.869 12.01 0.03
ATOM
        881
             CA
                        51
        882 HA
                 ARG
                                 0.709 -21.199
ATOM
                        51
                                                  3.323 1.01 0.05
            CB
                 ARG
                                 1.853 -23.012
                                                  3.221 12.01 -0.08
ATOM
        883
                        51
ATOM
        884
             HB1 ARG
                        51
                                 1.977 -23.009
                                                  4.303 1.01 0.06
             HB2 ARG
                                 1.718 -24.041
ATOM
        885
                        51
                                                  2.885 1.01 0.06
ATOM
        886
             CG
                 ARG
                                 3.112 -22.438
                        51
                                                  2.549 12.01 -0.10
             HG1 ARG
                                 3.952 -23.075
                                                  2.798 1.01 0.07
ATOM
        887
                        51
             HG2 ARG
                                 3.018 -22.474
ATOM
        888
                        51
                                                  1.467 1.01 0.07
             CD
                                 3.407 -21.002
ATOM
        889
                 ARG
                                                  3.001 12.01 -0.23
                        51
ATOM
        890
             HD1 ARG
                                 2.616 -20.336
                        51
                                                  2.660 1.01 0.13
ATOM
             HD2 ARG
                                 3.448 -20.982
        891
                        51
                                                  4.089 1.01 0.13
                                                  2.471 14.01 -0.32
ATOM
        892
             NE
                 ARG
                                  4.688 -20.519
                        51
ATOM
        893
             HE
                 ARG
                        51
                                  5.334 -21.230
                                                  2.140 1.01 0.27
ATOM
        894
             CZ
                 ARG
                        51
                                  5.072 - 19.234
                                                  2.399 12.01 0.76
             NH1 ARG
ATOM
        895
                        51
                                  4.272 -18.252
                                                  2.830 14.01 -0.62
        896 HH11 ARG
ATOM
                        51
                                  4.552 - 17.286
                                                  2.785 1.01 0.36
        897 HH12 ARG
ATOM
                        51
                                  3.502 -18.505
                                                  3.450 1.01 0.36
ATOM
        898 NH2 ARG
                        51
                                  6.273 - 18.922
                                                  1.903 14.01 -0.62
ATOM
        899 HH21 ARG
                                  6.603 - 17.971
                        51
                                                  1.890 1.01 0.36
ATOM
        900 HH22 ARG
                                  6.923 -19.671
                                                  1.672 1.01 0.36
                        51
                 ARG
ATOM
        901
             C
                        51
                                  0.475 - 22.036
                                                  1.361 12.01 0.62
ATOM
        902
             0
                 ARG
                        51
                                  0.807 - 20.981
                                                  0.829 16.00 -0.50
ATOM
        903
            N
                 TRP
                        52
                                 -0.009 -23.070
                                                  0.661 14.01 -0.46
ATOM
             HN
                 TRP
        904
                        52
                                 -0.283 -23.937
                                                  1.106 1.01 0.25
ATOM
        905
             CA
                 TRP
                        52
                                 -0.165 -22.988
                                                 -0.774 12.01 0.03
ATOM
             HA
                 TRP
                        52
                                  0.810 - 22.724
                                                 -1.183 1.01
        906
                                                               0.05
ATOM
        907
             CB
                 TRP
                        52
                                 -0.521 - 24.349
                                                 -1.351 12.01 -0.10
             HB1 TRP
ATOM
        908
                        52
                                  0.136 -25.102
                                                -0.916 1.01 0.04
ATOM
        909
             HB2 TRP
                        52
                                 -1.550 -24.600
                                                -1.089 1.01 0.04
ATOM
        910
             CG TRP
                        52
                                 -0.339 - 24.398
                                                 -2.830 12.01 -0.14
ATOM
        911
             CD1 TRP
                         52
                                 -1.338 - 24.385
                                                 -3.733 12.01
                                                              0.04
             HD1 TRP
ATOM
        912
                         52
                                 -2.381 - 24.338
                                                 -3.462 1.01 0.09
ATOM
        913
             NE1 TRP
                         52
                                 -0.817 - 24.447
                                                 -5.008 14.01 -0.35
ATOM
             HE1 TRP
                         52
                                 -1.367 -24.463
        914
                                                -5.862 1.01 0.27
ATOM
             CE2 TRP
                                  0.563 - 24.492
        915
                         52
                                                 -4.983 12.01
ATOM
             CZ2 TRP
                         52
                                  1.540 -24.559
        916
                                                 -5.988 12.01 -0.17
             HZ2 TRP
ATOM
                                  1.253 -24.584
                                                -7.028 1.01 0.08
        917
                         52
             CH2 TRP
ATOM
        918
                         52
                                  2.895 -24.594
                                                 -5.622 12.01 -0.08
ATOM
             HH2 TRP
                                  3.654 -24.682
        919
                         52
                                                 -6.383 1.01 0.07
ATOM
        920
             CZ3 TRP
                         52
                                  3.257 -24.558
                                                 -4.264 12.01 -0.07
             HZ3 TRP
ATOM
        921
                         52
                                  4.298 -24.581
                                                 -3.980 1.01 0.06
ATOM
        922
             CE3 TRP
                         52
                                  2.269 -24.492
                                                 -3.265 12.01 -0.17
ATOM
        923
             HE3 TRP
                                  2.565 -24.466
                                                 -2.227 1.01 0.09
                         52
ATOM
        924
             CD2 TRP
                         52
                                  0.898 - 24.460
                                                 -3.598 12.01 0.15
ATOM
             C
                 TRP
                                 -1.168 -21.899
                                                -1.162 12.01 0.62
        925
                         52
ATOM
             0
                 TRP
                         52
                                 -0.989 -21.246 -2.187 16.00 -0.50
        926
```

					(101)	7717712
	965					966
ATOM	927		ARG	53		-0.341 14.01 -0.46
ATOM	928		ARG	53		0.493 1.01 0.25
ATOM	929		ARG	53	-3.187 -20.628	-0.566 12.01 0.03
ATOM	930		ARG	53	-3.622 -20.758	-1.559 1.01 0.05
ATOM	931		ARG	53	-4.327 -20.740	0.467 12.01 -0.08
ATOM	932	HB1	ARG	53	-4.981 -21.552	0.147 1.01 0.06
ATOM	933	HB2	ARG	53	-3.931 -20.994	1.444 1.01 0.06
ATOM	934	CG	ARG	53	-5.160 -19.460	$0.622\ 12.01\ -0.10$
ATOM	935	HG1	ARG	53	-4.554 -18.676	1.078 1.01 0.07
ATOM	936	HG2	ARG	53	-5.475 -19.127	-0.368 1.01 0.07
ATOM	937	CD	ARG	53	-6.415 -19.683	1.482 12.01 -0.23
ATOM	938	HD1	ARG	53	-6.982 -18.751	1.474 1.01 0.13
ATOM	939	HD2	ARG	53	-7.023 -20.462	1.018 1.01 0.13
ATOM	940	NE	ARG	53	-6.111 -20.038	2.883 14.01 -0.32
ATOM	941	HE	ARG	53	-5.136 -20.115	3.146 1.01 0.27
ATOM	942	CZ	ARG	53	-7.045 -20.186	3.844 12.01 0.76
ATOM	943	NH1	ARG	53	-6.692 -20.475	5.102 14.01 -0.62
ATOM	944	НН11	ARG	53	-7.381 -20.592	5.838 1.01 0.36
ATOM		HH12		53	-5.707 -20.557	
ATOM	946	NH2		53	-8.343 -20.056	
ATOM	947	HH21		53	-9.034 -20.098	4.290 1.01 0.36
ATOM		HH22		53	-8.636 -19.802	2.612 1.01 0.36
ATOM	949	С	ARG	53	-2.447 -19.286	-0.545 12.01 0.62
ATOM	950	0	ARG	53	-2.575 -18.500	-1.481 16.00 -0.50
ATOM	951	N	THR	54	-1.655 -19.035	
ATOM	952	HN	THR	54	-1.586 -19.725	1.245 1.01 0.25
ATOM	953	CA	THR	54	-0.866 -17.815	0.648 12.01 0.03
ATOM	954	НА	THR	54	-1.547 -16.964	
ATOM	955	СВ	THR	54	-0.111 -17.873	
ATOM	956	НВ	THR	54	0.586 -18.711	
ATOM	957		THR	54	0.678 -16.589	
ATOM		HG21		54	0.002 -15.735	2.297 1.01 0.07
ATOM		HG22		54	1.210 -16.692	3.179 1.01 0.07
ATOM		HG23		54	1.412 -16.416	1.452 1.01 0.07
ATOM	961		THR	54	-1.037 -18.067	
ATOM	962		THR	54	-0.558 -18.303	3.831 1.01 0.31
ATOM	963		THR	54	0.104 -17.636	-0.529 12.01 0.62
ATOM	964		THR	54	0.166 -16.566	-1.136 16.00 -0.50
ATOM	965		MET	55	0.862 -18.692	-0.846 14.01 -0.46
ATOM	966		MET	55	0.750 -19.535	
ATOM	967		MET	55	1.838 -18.724	-1.924 12.01 0.03
ATOM	968		MET	55	2.635 -18.015	-1.701 1.01 0.05
ATOM	969		MET	55	2.421 -20.140	-2.048 12.01 -0.15
ATOM	970		MET	55	1.600 -20.852	-2.072 1.01 0.03
ATOM	971		MET	55	2.957 -20.242	-2.990 1.01 0.03
ATOM	972		MET	55	3.355 -20.505	-0.887 12.01 -0.05
ATOM	973		MET	55	3.205 -19.815	
ATOM	974		MET		3.095 -21.506	
ATOM	975		MET		5.119 -20.557	
ATOM	976		MET		5.059 -20.897	
.11014	010			00	5.555 20.601	1.000 1.00 0.00

```
967
                                                               968
ATOM
       977 LP2 MET
                       55
                                5.344 -20.392 -0.664 1.00 -0.38
ATOM
       978 CE MET
                       55
                                5.315 -18.918 -2.015 12.01 -0.13
ATOM
            HE1 MET
                       55
                                6.363 -18.770 -2.271 1.01 0.07
       979
ATOM
      980
            HE2 MET
                       55
                                4.707 -18.827 -2.919 1.01 0.07
           HE3 MET
ATOM
       981
                       55
                                5.004 -18.176 -1.283 1.01 0.07
       982
           C
                MET
ATOM
                       55
                                1.178 -18.319 -3.235 12.01 0.62
ATOM
       983 0
                MET
                                1.581 -17.338 -3.853 16.00 -0.50
                       55
ATOM
       984 N
                LYS
                       56
                                0.164 -19.084 -3.647 14.01 -0.46
ATOM
       985 HN LYS
                               -0.103 -19.873 -3.074 1.01 0.25
                       56
ATOM
       986 CA LYS
                       56
                               -0.584 -18.865 -4.870 12.01 0.03
ATOM
       987
            HA LYS
                                0.130 -18.918 -5.690 1.01 0.05
                       56
ATOM
        988
            CB LYS
                       56
                               -1.577 -20.019 -5.071 12.01 -0.10
ATOM
        989
            HB1 LYS
                               -1.013 -20.952 -5.033 1.01 0.04
                       56
            HB2 LYS
ATOM
        990
                       56
                               -2.317 -20.020 -4.269 1.01 0.04
        991 CG LYS
ATOM
                               -2.285 -19.926 -6.429 12.01 -0.16
                       56
        992 HG1 LYS
ATOM
                       56
                               -3.125 -19.234 -6.352 1.01 0.12
           HG2 LYS
ATOM
        993
                               -1.586 -19.542 -7.173 1.01 0.12
                       56
ATOM
        994
            CD LYS
                       56
                               -2.777 -21.289 -6.932 12.01 -0.18
        995 HD1 LYS
ATOM
                               -3.283 -21.131 -7.886 1.01 0.12
                       56
ATOM
        996
            HD2 LYS
                       56
                               -1.912 -21.934 -7.102 1.01 0.12
ATOM
            CE LYS
        997
                       56
                               -3.736 -21.978 -5.955 12.01 -0.04
ATOM
        998
            HE1 LYS
                       56
                               -3.197 -22.248 -5.045 1.01 0.10
ATOM
        999
            HE2 LYS
                       56
                               -4.552 -21.303 -5.694 1.01 0.10
            NZ LYS
ATOM
       1000
                       56
                               -4.299 -23.205 -6.546 14.01 -0.14
ATOM
       1001
            HZ1 LYS
                       56
                               -3.556 -23.814 -6.879 1.01 0.29
            HZ2 LYS
ATOM
       1002
                       56
                               -4.781 -23.762 -5.844 1.01
                                                            0.29
ATOM
       1003 HZ3 LYS
                               -4.928 -22.997 -7.306 1.01
                 LYS
ATOM
       1004 C
                       56
                               -1.245 -17.482 -4.884 12.01 0.62
       1005 0
                LYS
ATOM
                       56
                               -1.356 -16.872 -5.943 16.00 -0.50
ATOM
       1006 N
                LYS
                       57
                               -1.677 -16.978 -3.723 14.01 -0.46
                LYS
                               -1.566 -17.520 -2.874 1.01
ATOM
       1007 HN
                       57
                                                            0.25
                LYS
ATOM
       1008
            CA
                       57
                               -2.309 -15.672 -3.615 12.01
                                                             0.03
ATOM
       1009 HA
                LYS
                       57
                               -3.131 -15.630 -4.333 1.01 0.05
ATOM
       1010 CB
                LYS
                       57
                               -2.917 -15.496 -2.212 12.01 -0.10
ATOM
       1011 HB1 LYS
                       57
                               -3.760 -16.182 -2.109 1.01
                                                            0.04
ATOM
       1012 HB2 LYS
                       57
                               -2.173 -15.750 -1.460 1.01 0.04
ATOM
       1013 CG LYS
                       57
                               -3.401 -14.065 -1.922 12.01 -0.16
ATOM
       1014 HG1 LYS
                               -2.559 -13.377 -1.976 1.01 0.12
                       57
ATOM
       1015
            HG2 LYS
                       57
                               -4.145 -13.773
                                              -2.665 1.01 0.12
ATOM
       1016
            CD LYS
                       57
                               -4.009 -13.987
                                               -0.515 12.01 -0.18
ATOM
       1017
            HD1 LYS
                       57
                               -4.921 -14.586
                                               -0.500 1.01 0.12
ATOM
       1018 HD2 LYS
                       57
                               -3.312 -14.406
                                                0.215 1.01 0.12
ATOM
            CE LYS
       1019
                       57
                               -4.363 -12.548
                                               -0.110 12.01 -0.04
ATOM
       1020 HE1 LYS
                       57
                               -5.002 -12.095
                                               -0.869 1.01 0.10
ATOM
       1021
            HE2 LYS
                                -4.915 -12.579
                       57
                                                0.830 1.01
                                                            0.10
ATOM
            NZ LYS
       1022
                       57
                               -3.170 -11.703
                                                0.096 14.01 -0.14
ATOM
            HZ1 LYS
                               -2.651 -11.591
       1023
                       57
                                               -0.762 1.01
                                                             0.29
ATOM
       1024
            HZ2 LYS
                        57
                               -3.459 -10.779
                                                0.408 1.01
                                                             0.29
ATOM
            HZ3 LYS
                        57
                               -2.571 -12.097
                                                0.808 1.01
       1025
                                                             0.29
ATOM
       1026 C LYS
                                -1.338 -14.535 -3.944 12.01 0.62
```

```
969
                                                                970
      1027 0
ATOM
                LYS
                       57
                                -1.626 -13.741 -4.837 16.00 -0.50
ATOM
       1028
            N
                 LEU
                       58
                                -0.227 -14.418 -3.200 14.01 -0.46
ATOM
       1029 HN
                 LEU
                        58
                                -0.054 -15.096 -2.466 1.01 0.25
       1030 CA
                 LEU
                                 0.707 -13.305 -3.359 12.01 0.03
ATOM
                        58
ATOM
       1031 HA
                 LEU
                        58
                                 0.156 -12.477 -3.808 1.01 0.05
            CB
                 LEU
                                 1.130 -12.791 -1.976 12.01 -0.06
ATOM
       1032
                        58
ATOM
       1033
            HB1 LEU
                        58
                                 0.228 -12.681 -1.372 1.01 0.03
             HB2 LEU
ATOM
       1034
                        58
                                 1.771 -13.526 -1.486 1.01 0.03
ATOM
       1035
            CG
                 LEU
                        58
                                 1.834 -11.422 -2.070 12.01 -0.01
       1036 HG
                 LEU
                                 1.607 -10.946 -3.024 1.01
ATOM
                        58
ATOM
       1037 CD1 LEU
                        58
                                 1.353 -10.469 -0.975 12.01 -0.11
ATOM
       1038 HD11 LEU
                                 1.659 -10.846 -0.001 1.01
                                                             0.03
                        58
ATOM
       1039 HD12 LEU
                                 1.796 -9.484 -1.129 1.01
                                                             0.03
                        58
ATOM
       1040 HD13 LEU
                                 0.268 -10.371 -1.009 1.01
                                                              0.03
                        58
ATOM
       1041 CD2 LEU
                                 3.352 -11.576 -1.957 12.01 -0.11
                        58
ATOM
       1042 HD21 LEU
                                 3.713 -12.148
                                               -2.806 1.01
                                                              0.03
                        58
ATOM
       1043 HD22 LEU
                        58
                                 3.832 -10.597 -1.967 1.01
                                                              0.03
ATOM
       1044 HD23 LEU
                                 3.608 -12.087 -1.029 1.01
                                                              0.03
                        58
ATOM
       1045 C
                 LEU
                        58
                                 1.913 -13.561 -4.267 12.01
                                                              0.62
ATOM
       1046 0
                 LEU
                                 2.192 -12.738 -5.136 16.00 -0.50
                        58
ATOM
       1047 N
                 LYS
                        59
                                 2.656 -14.658 -4.078 14.01 -0.46
ATOM
             HN
                 LYS
                                 2.405 -15.330
                                               -3.365 1.01
                                                              0.25
       1048
                        59
ATOM
       1049
             CA
                 LYS
                        59
                                 3.838 - 14.929
                                               -4.898 12.01
                                                              0.03
ATOM
       1050
             HA
                 LYS
                                 4.405 -14.006
                                               -5.029 1.01
                                                              0.05
                        59
ATOM
       1051
             CB LYS
                        59
                                 4.760 - 15.946
                                               -4.214 12.01 -0.10
             HB1 LYS
                                 4.243 -16.904
                                               -4.170 1.01
ATOM
       1052
                        59
                                                              0.04
ATOM
       1053
             HB2 LYS
                        59
                                 5.653 -16.073 -4.828 1.01 0.04
ATOM
       1054
             CG LYS
                                 5.190 -15.560 -2.789 12.01 -0.16
                        59
ATOM
       1055
             HG1 LYS
                        59
                                 4.305 -15.464 -2.159 1.01 0.12
                                 5.809 -16.370 -2.412 1.01 0.12
ATOM
       1056
             HG2 LYS
                        59
ATOM
       1057
             CD LYS
                        59
                                 6.041 -14.285
                                               -2.713 12.01 -0.18
ATOM
       1058
             HD1 LYS
                                 6.842 -14.348
                                               -3.452 1.01 0.12
                        59
ATOM
       1059
             HD2 LYS
                        59
                                 5.435 -13.416 -2.949 1.01 0.12
ATOM
       1060
             CE LYS
                                 6.681 - 14.108
                                               -1.325 12.01 -0.04
             HE1 LYS
ATOM
       1061
                        59
                                 7.389 -14.921
                                                -1.160 1.01
                                                              0.10
             HE2 LYS
ATOM
       1062
                        59
                                 7.230 -13.165
                                               -1.305 1.01
                                                              0.10
ATOM
       1063
             NZ LYS
                        59
                                 5.695 -14.112 -0.223 14.01 -0.14
             HZ1 LYS
                        59
                                 5.028 -13.355
                                                -0.290 1.01
                                                              0.29
ATOM
       1064
             HZ2 LYS
                                 5.180 -14.979
                                                -0.201 1.01
                                                              0.29
ATOM
       1065
                        59
             HZ3 LYS
                        59
                                 6.150 - 13.998
                                                 0.671 1.01 0.29
ATOM
       1066
                                 3.410 -15.423 -6.282 12.01
ATOM
       1067
             C
                 LYS
                        59
                                                              0.62
             0
                 LYS
                                  4.042 -15.105 -7.287 16.00 -0.50
ATOM
       1068
                        59
ATOM
       1069
             N
                 LEU
                        60
                                 2.323 -16.197 -6.305 14.01 -0.46
ATOM
       1070
             HN
                 LEU
                        60
                                 1.880 -16.394 -5.418 1.01
                                                              0.25
ATOM
       1071
             CA
                 LEU
                        60
                                  1.694 - 16.776
                                                -7.473 12.01
                                                              0.03
ATOM
       1072
             HA LEU
                        60
                                  0.878 -17.358
                                                -7.062 1.01
                                                              0.05
        1073
             CB LEU
                                  1.087 -15.680
                                                -8.368 12.01 -0.06
 ATOM
                         60
 ATOM
       1074
             HB1 LEU
                        60
                                  0.746 - 14.875
                                                -7.715 1.01 0.03
 ATOM
        1075
             HB2 LEU
                         60
                                  1.844 - 15.269
                                                -9.037 1.01 0.03
 ATOM
       1076 CG LEU
                                 -0.142 -16.147 -9.172 12.01 -0.01
```

	971				(101)			972
ATOM	1077	uс	I EII	60	-0.882 -16.558	_0 406	1 01	
		CD1		60	-0.777 -14.937			
ATOM	1078 1079							
ATOM				60	-1.056 -14.189			0.03
ATOM	1080			60	-0.072 -14.497			
ATOM	1081			60	-1.675 -15.247			
ATOM	1082			60	0.179 -17.216			
ATOM	1083				0.977 -16.868			0.03
ATOM	1084				0.476 -18.147			0.03
ATOM	1085			60				
ATOM'	1086		LEU	60	2.598 -17.771			
ATOM	1087		LEU	60	3.097 -17.505			
ATOM	1088		ILE	61	2.776 -18.948			
ATOM	1089	HN	ILE	61	2.331 -19.102	-6.692	1.01	0.25
ATOM	1090	CA	ILE	61	3.551 -20.022	-8.193	12.01	0.03
ATOM	1091	HA	ILE	61	4.474 -19.610			
ATOM	1092	CB	ILE	61	3.937 -21.096	-7.163	12.01	-0.01
ATOM	1093		ILE	61	3.040 -21.455	-6.656	1.01	0.02
ATOM	1094	CG2	ILE	61	4.608 -22.271	-7.896	12.01	-0.08
ATOM	1095	HG21	ILE	61	5.423 -21.900	-8.517	1.01	0.03
ATOM	1096	HG22	ILE	61	5.004 -22.995	-7.191	1.01	0.03
ATOM	1097	HG23	ILE	61	3.889 -22.790	-8.530	1.01	0.03
ATOM	1098	CG1	ILE	61	4.896 -20.483	-6.129	12.01	-0.05
ATOM	1099	HG11	ILE	61	5.848 -20.242	-6.605	1.01	0.03
ATOM	1100	HG12	ILE	61	4.467 -19.563	-5.730	1.01	0.03
ATOM	1101	CD1	ILE	61	5.145 -21.411	-4.939	12.01	-0.08
ATOM	1102	HD1	ILE	61	4.194 -21.686	-4.483	1.01	0.03
ATOM	1103	HD2	ILE	61	5.672 -22.312	-5.244	1.01	0.03
ATOM	1104	HD3	ILE	61	5.759 -20.887	-4.207	1.01	0.03
ATOM	1105	C	ILE	61	2.695 -20.591	-9.328	12.01	0.62
ATOM	1106	0	ILE	61-	1.706 -21.279	-9.082	16.00	-0.50
ATOM	1107	N	SER	62	3.079 -20.278	-10.567	14.01	-0.46
ATOM	1108	HN	SER	62	3.900 -19.700	-10.670	1.01	0.25
ATOM	1109	CA	SER	62	2.373 -20.692	-11.769	12.01	0.03
ATOM	1110	HA	SER	62	1.304 -20.735	-11.552	1.01	0.05
ATOM	1111	CB	SER	62	2.582 -19.625	-12.854	12.01	0.02
ATOM	1112	HB1	SER	62	2.231 -18.662	-12.480	1.01	0.12
ATOM	1113	HB2	SER	62	3.643 -19.542	-13.098	1.01	0.12
ATOM	1114	OG	SER	62	1.864 -19.934	-14.034	16.00	-0.55
ATOM	1115	HG	SER	62	2.311 -20.646	-14.508	1.01	0.31
ATOM	1116	С	SER	62	2.825 -22.061	-12.280	12.01	0.62
ATOM	1117	0	SER	62	3.924 -22.539	-11.983	16.00	-0.50
ATOM	1118	N	SER	63	1.953 -22.660	-13.095	14.01	-0.46
ATOM	1119	HN	SER	63	1.082 -22.187	-13.299	1.01	0.25
ATOM	1120	CA	SER	63	2.165 -23.916	-13.785		
ATOM	1121	HA	SER	63	2.761 -24.596			
ATOM	1122	CB	SER	63	0.802 -24.558			
ATOM	1123		SER	63	0.914 -25.415			
ATOM	1124		SER	63	0.366 -24.902			
ATOM	1125	OG	SER	63	-0.076 -23.611	-14.645		
ATOM	1126	HG	SER	63	0.286 -23.310	-15.483	1.01	0.31

```
973
                                                                974
       1127 C
ATOM
                 SER
                        63
                                 2.909 -23.591 -15.083 12.01 0.62
ATOM
       1128 0
                 SER
                        63
                                 2.980 -22.428 -15.483 16.00 -0.50
      1129 N
                 ASP
                                 3.462 -24.614 -15.739 14.01 -0.46
ATOM
                        64
ATOM
       1130 HN
                 ASP
                        64
                                 3.376 -25.549 -15.368 1.01 0.25
                 ASP
                                 4.206 -24.449 -16.983 12.01 0.03
ATOM
       1131 CA
                        64
                                 4.893 -23.607 -16.869 1.01 0.05
ATOM
       1132 HA
                 ASP
                        64
ATOM
       1133 CB
                ASP
                        64
                                 5.049 -25.701 -17.247 12.01 -0.40
ATOM
       1134
            HB1 ASP
                                 4.391 -26.554 -17.419 1.01 0.07
                        64
ATOM
       1135 HB2 ASP
                                 5.656 -25.545 -18.139 1.01 0.07
                        64
ATOM
       1136
             CG
                ASP
                                 5.977 -26.004 -16.076 12.01 0.71
                        64
ATOM
       1137
             OD1 ASP
                        64
                                 6.064 -27.189 -15.692 16.00 -0.72
ATOM
             OD2 ASP
       1138
                                 6.527 -25.043 -15.493 16.00 -0.72
                        64
ATOM
       1139 C
                 ASP
                                 3.278 -24.119 -18.155 12.01 0.62
                        64
ATOM
                 ASP
       1140 0
                                 3.677 -23.394 -19.062 16.00 -0.50
                        64
ATOM
       1141 N
                 SER
                        65
                                 2.044 -24.641 -18.122 14.01 -0.46
ATOM
       1142
             HN
                 SER
                        65
                                 1.802 -25.226 -17.339 1.01 0.25
ATOM
       1143 CA
                 SER
                        65
                                 1.013 -24.430 -19.133 12.01 0.03
ATOM
             HA
                 SER
                                 0.091 -24.848 -18.727 1.01
                                                             0.05
       1144
                        65
ATOM
       1145
             CB
                 SER
                        65
                                 0.774 -22.929 -19.371 12.01 0.02
       1146 HB1 SER
ATOM
                        65
                                 0.769 -22.394 -18.421 1.01 0.12
ATOM
       1147 HB2 SER
                        65
                                 1.559 -22.515 -20.007 1.01 0.12
       1148
             OG
                 SER
                                -0.473 -22.718 -20.004 16.00 -0.55
ATOM
                        65
ATOM
       1149 HG
                 SER
                        65
                                -0.328 -22.128 -20.759 1.01 0.31
ATOM
       1150 C
                 SER
                        65
                                 1.320 -25.181 -20.435 12.01 0.62
             0
                 SER
ATOM
       1151
                        65
                                 2.254 -25.979 -20.500 16.00 -0.50
                 GLU
                                 0.507 -24.908 -21.460 14.01 -0.46
ATOM
       1152
            N
                        66
ATOM
                 GLU
       1153
             HN
                        66
                                -0.227 -24.231 -21.297 1.01
                                                              0.25
                 GLU
                                 0.581 -25.472 -22.797 12.01
ATOM
       1154
             CA
                        66
ATOM
       1155
             HA
                 GLU
                        66
                                 1.408 -26.179 -22.871 1.01 0.05
ATOM
             CB
                GLU
                                -0.743 -26.208 -23.073 12.01 -0.18
       1156
                        66
ATOM
       1157
             HB1 GLU
                        66
                                -0.956 -26.880 -22.241 1.01 0.09
ATOM
       1158
             HB2 GLU
                                -1.551 -25.478 -23.137 1.01 0.09
                        66
ATOM
       1159
             CG GLU
                        66
                                -0.724 -27.044 -24.359 12.01 -0.40
ATOM
       1160
             HG1 GLU
                                -1.740 -27.379 -24.565 1.01 0.07
             HG2 GLU
                                -0.388 -26.432 -25.196 1.01 0.07
ATOM
       1161
                        66
ATOM
       1162
            CD GLU
                                 0.165 -28.277 -24.232 12.01 0.71
             OE1 GLU
                                 1.247 -28.269 -24.857 16.00 -0.72
ATOM
       1163
                        66
ATOM
       1164 OE2 GLU
                        66
                                -0.261 -29.210 -23.517 16.00 -0.72
                                 0.836 -24.298 -23.747 12.01 0.62
ATOM
       1165 C
                 GLU
                        66
ATOM
       1166
            0
                 GLU
                        66
                                -0.020 -23.941 -24.556 16.00 -0.50
ATOM
       1167 N
                 ASP
                                 2.021 -23.690 -23.618 14.01 -0.46
                        67
ATOM
       1168 HN ASP
                        67
                                 2.678 -24.033 -22.931 1.01 0.25
ATOM
       1169
            CA ASP
                        67
                                 2.463 -22.540 -24.392 12.01 0.03
ATOM
       1170
             HA ASP
                        67
                                 1.880 -22.445 -25.310 1.01 0.05
ATOM
       1171
             CB ASP
                        67
                                 2.303 -21.260 -23.557 12.01 -0.40
ATOM
       1172
             HB1 ASP
                        67
                                 2.851 -21.370 -22.621 1.01
                                                               0.07
       1173
             HB2 ASP
                                 2.736 -20.427 -24.112 1.01 0.07
ATOM
ATOM
       1174
             CG ASP
                        67
                                 0.845 -20.927 -23.250 12.01 0.71
             OD1 ASP
ATOM
       1175
                                 0.238 -20.208 -24.074 16.00 -0.72
 ATOM
       1176
             OD2 ASP
                                 0.365 -21.374 -22.184 16.00 -0.72
```

					(489)				付用 乙
	975								976
ATOM	1177		ASP	67			-24.772		
ATOM	1178	0T1	ASP	67	4.329	-22.199	-25.823	16.00	-0.71
ATOM	1179	0T2	ASP	67	4.662	-23.300	-23.921	16.00	-0.71
TER									
ATOM	1180	H05'	GUA	68	-8.270	-39.727	11.107	1.01	0.28
ATOM	1181	05'	GUA	68	-7.363	-40.032	11.189	16.00	-0.40
ATOM	1182	C5'	GUA	68	-7.023	-40.715	10.001	12.01	0.12
ATOM	1183	H5'1	GUA	68	-7.624	-41.623	9.934	1.01	0.02
ATOM	1184	H5'2	GUA	68	-5.967	-40.986	10.026	1.01	0.02
ATOM	1185	C4'	GUA	68	-7.302	-39.833	8.781	12.01	0.04
ATOM	1186	H4'	GUA	68	-7.129	-40.410	7.870	1.01	0.06
ATOM	1187	04'	GUA	68	-8.641	-39.376	8.777	16.00	-0.37
ATOM	1188	C1'	GUA	68	-8.721	-38.329	7.834	12.01	0.38
ATOM	1189	H1'	GUA-	68		-38.692			
ATOM	1190	N9	GUA	68		-37.472			-0.04
ATOM	1191	C8	GUA	68		-36.883			
ATOM	1192	Н8	GUA	68		-36.965			
ATOM	1193		GUA	68			9.146		
ATOM	1194	C5	GUA	68			7.807		
ATOM	1195	C6	GUA	68		-35.834		12.01	
ATOM	1196	06	GUA	68		-35.229			-0.46
ATOM	1197	N1	GUA	68		-36.083			-0.73
ATOM	1198	H1	GUA	68		-35.712			0.34
ATOM	1199	C2	GUA	68		-36.793		12.01	
ATOM	1200	N2	GUA	68		-36.929			-0.78
ATOM	1201		GUA	68		-36.504		1.01	
ATOM	1202		GUA	68		-37.417		1.01	
ATOM	1203		GUA	68		-37.327			-0.71
ATOM	1203		GUA	68 -		-37.069			0.39
ATOM	1205		GUA	68 -			8.740		
ATOM	1206		GUA	68		-38.210			0.03
ATOM	1207		GUA	68		-37.567			-0.31
ATOM		H2' 1		68			8.718		
ATOM		H2' 2		68		-37.191		1.01	
ATOM	1210			68		-38.779			-0.51
ATOM	1210	P	THY	69		-37.608		30.97	
ATOM	1211		THY	69		-36.686			-0.85
ATOM	1213		THY	69		-38.251			-0.85
ATOM	1213		THY	69		-36.820			-0.51
ATOM	1215		THY	69		-37.521		12.01	
ATOM		H5'1		69		-37.321			
		H5' 2							
ATOM ATOM	1217			69 69		-38.433 -36.674		1.01 12.01	
ATOM	1218		THY	69		-36.674 -37.334			
ATOM	1219		THY	69		-31.334 -36.237			0.06
ATOM	1220		THY	69		-36.23 <i>1</i> -35.064			
ATOM	1221		THY	69		-35.064 -35.282		12.01	
ATOM	1222		THY	69		-35.282 -34.377			-0.22
ATOM	1223		THY	69		-34.377 -34.308		12.01	
ATOM	1224		THY	69		-34.30d : -34.789			
VIOW	1223	110	1111	UĐ	1.012	34.108	1.103	1.01	0.13

```
977
                                                                 978
       1226 C5 THY
ATOM
                        69
                                -9.544 - 33.706
                                                 7.757 12.01 -0.18
ATOM
       1227 C7 THY
                        69
                                -9.063 -33.649
                                                 9.196 12.01 -0.38
       1228 H71 THY
ATOM
                        69
                                -9.919 -33.733
                                                 9.866 1.01 0.11
       1229 H72 THY
ATOM
                        69
                                -8.365 -34.456
                                                  9.420 1.01 0.11
       1230 H73 THY
ATOM
                        69
                                -8.573 -32.691
                                                 9.369 1.01 0.11
ATOM
       1231 C4
                 THY
                        69
                               -10.811 -33.134
                                                 7.352 12.01 0.81
ATOM
       1232 04
                 THY
                               -11.612 -32.574
                                                 8.094 16.00 -0.46
                        69
ATOM
       1233 N3
                 THY
                        69
                               -11.081 -33.265
                                                  6.000 14.01 -0.85
ATOM
       1234 H3
                 THY
                               -11.970 -32.899
                        69
                                                  5.674 1.01 0.35
ATOM
       1235 C2
                 THY
                        69
                               -10.251 -33.853
                                                  5.055 12.01 0.85
                 THY
ATOM
       1236
            02
                               -10.590 -33.896
                                                  3.877 16.00 -0.49
                        69
ATOM
       1237
            C3'
                 THY
                        69
                                -5.875 -35.410
                                                  3.880 12.01 0.23
       1238
            Н3'
                 THY
ATOM
                        69
                                -4.874 -35.256
                                                  4.286 1.01 0.03
ATOM
       1239 C2' THY
                        69
                                -6.813 -34.311
                                                  4.386 12.01 -0.31
       1240 H2' 1 THY
                                -6.425 -33.949
ATOM
                        69
                                                  5.337 1.01 0.08
ATOM
       1241 H2'2 THY
                        69
                                -6.919 -33.492
                                                  3.683 1.01 0.08
       1242 03' THY
ATOM
                        69
                                -5.827 -35.491
                                                  2.466 16.00 -0.51
ATOM
       1243 P
                 THY
                        70
                                -5.052 -34.373
                                                  1.598 30.97 1.39
       1244 OP1 THY
ATOM
                        70
                                -4.105 -33.693
                                                  2.503 16.00 -0.85
       1245 OP2 THY
ATOM
                        70
                                -4.524 -35.007
                                                  0.369 16.00 -0.85
       1246 05' THY
ATOM
                        70
                                -6.194 -33.309
                                                  1.214 16.00 -0.51
ATOM
       1247 C5' THY
                        70
                                -7.258 -33.623
                                                  0.338 12.01 0.12
       1248 H5' 1 THY
ATOM
                                 -6.897 -33.653
                                                 -0.691 1.01 0.02
                        70
       1249 H5' 2 THY
ATOM
                        70
                                -7.680 -34.595
                                                  0.600 1.01 0.02
       1250 C4' THY
ATOM
                        70
                                 -8.357 -32.564
                                                  0.484 12.01 0.04
       1251 H4' THY
                        70
                                -9.217 -32.842
                                                 -0.128 1.01 0.06
ATOM
       1252 04'
                 THY
                                -8.770 -32.474
                                                  1.831 16.00 -0.37
ATOM
                        70
ATOM
       1253 C1'
                 THY
                        70
                                -9.423 -31.236
                                                  1.992 12.01 0.38
       1254
ATOM
             H1'
                 THY
                        70
                                -10.379 -31.263
                                                  1.471 1.01 0.01
ATOM
       1255
             N1
                 THY
                        70
                                 -9.564 -30.886
                                                  3.427 14.01 -0.22
       1256
             60
                 THY
                                -8.508 -31.054
                                                  4.289 12.01 0.03
ATOM
                        70
ATOM
       1257
             Н6
                 THY
                        70
                                 -7.571 -31.412
                                                  3.890 1.01 0.13
ATOM
       1258
             C5
                 THY
                        70
                                 -8.629 -30.767
                                                  5.608 12.01 -0.18
             C7 THY
ATOM
       1259
                        70
                                 -7.387 -31.000
                                                  6.443 12.01 -0.38
                                                  7.494 1.01 0.11
       1260
            H71 THY
                                 -7.600 -30.807
ATOM
                        70
ATOM
       1261
             H72 THY
                                 -7.059 -32.032
                        70
                                                  6.342 1.01 0.11
ATOM
       1262
             H73 THY
                         70
                                 -6.590 -30.340
                                                  6.103 1.01 0.11
ATOM
       1263 C4 THY
                         70
                                 -9.872 -30.272
                                                  6.166 12.01 0.81
ATOM
       1264
             04
                 THY
                         70
                                -10.067 -29.974
                                                  7.341 16.00 -0.46
                 THY
ATOM
        1265
             N3
                         70
                                -10.892 -30.155
                                                  5.239 14.01 -0.85
             Н3
                 THY
ATOM
        1266
                         70
                                -11.784 -29.804
                                                  5.565 1.01 0.35
        1267
             C2
                 THY
                                -10.785 -30.384
ATOM
                         70
                                                  3.878 12.01
                                                               0.85
             02
        1268
                 THY
                         70
                                -11.720 -30.115
                                                  3.130 16.00 -0.49
ATOM
             C3'
                 THY
ATOM
        1269
                         70
                                 -7.910 -31.137
                                                  0.131 12.01 0.23
       1270 H3'
                 THY
                                 -6.823 -31.073
ATOM
                         70
                                                  0.154 1.01 0.03
        1271 C2' THY
ATOM
                         70
                                 -8.499 -30.273
                                                  1.257 12.01 -0.31
        1272 H2' 1 THY
                         70
                                 -7.692 -29.903
                                                  1.889 1.01 0.08
ATOM
        1273 H2' 2 THY
                                 -9.088 -29.431
ATOM
                         70
                                                  0.906 1.01 0.08
ATOM
        1274 03' THY
                         70
                                 -8.395 -30.780
                                                 -1.151 16.00 -0.51
ATOM
        1275 P
                 ADE
                         71
                                 -8.000 -29.379 -1.845 30.97 1.39
```

```
979
                                                                 980
ATOM
       1276 OP1 ADE
                        71
                                -6.668 -28.972 -1.343 16.00 -0.85
ATOM
       1277 OP2 ADE
                        71
                                -8.241 -29.486 -3.299 16.00 -0.85
       1278 05' ADE
ATOM
                        71
                                -9.055 -28.345 -1.229 16.00 -0.51
ATOM
       1279 C5' ADE
                               -10.406 -28.275 -1.631 12.01 0.12
                        71
ATOM
       1280 H5' 1 ADE
                               -10.453 -28.024 -2.692 1.01 0.02
                        71
ATOM
       1281 H5' 2 ADE
                               -10.914 -29.225
                        71
                                                -1.460 1.01 0.02
ATOM
       1282 C4' ADE
                               -11.086 -27.160
                                                -0.823 12.01 0.04
                        71
ATOM
       1283 H4' ADE
                               -12.038 -26.903
                        71
                                                -1.289 1.01 0.06
ATOM
       1284
             04'
                 ADE
                        71
                               -11.312 -27.584
                                                  0.524 16.00 -0.37
ATOM
       1285
             C1'
                 ADE
                        71
                               -10.970 -26.516
                                                  1.382 12.01 0.38
ATOM
       1286
             H1'
                 ADE
                        71
                               -11.723 -25.728
                                                  1.339 1.01 0.01
ATOM
       1287
             N9
                 ADE
                        71
                               -10.682 -26.885
                                                  2.787 14.01 -0.07
ATOM
       1288
             68
                 ADE
                                -9.537 -27.449
                        71
                                                  3.287 12.01 0.26
ATOM
       1289
             Н8
                 ADE
                        71
                                -8.745 -27.799
                                                  2.656 1.01 0.06
ATOM
       1290
             N7
                 ADE
                                -9.462 -27.493
                        71
                                                  4.584 14.01 -0.54
ATOM
       1291
             C5
                 ADE
                        71
                               -10.658 -26.914
                                                  4.981 12.01 -0.10
ATOM
       1292
             С6
                 ADE
                                -11.201 -26.647
                                                  6.248 12.01 0.77
                        71
ATOM
       1293
             N6
                 ADE
                        71
                                -10.572 -26.997
                                                  7.370 14.01 -0.77
       1294
             H61 ADE
ATOM
                        71
                                -10.973 -26.803
                                                  8.276 1.01 0.32
ATOM
       1295
             H62 ADE
                        71
                                -9.723 -27.540
                                                  7.301 1.01 0.34
ATOM
       1296
             N1
                 ADE
                        71
                                -12.381 -26.005
                                                  6.325 14.01 -0.77
ATOM
       1297
             C2
                 ADE
                        71
                                -12.994 -25.655
                                                  5.195 12.01 0.66
             Н2
                 ADE
ATOM
       1298
                        71
                                -13.948 - 25.163
                                                  5.308 1.01 -0.03
             N3
                 ADE
ATOM
       1299
                        71
                                -12.594 -25.860
                                                  3.942 14.01 -0.73
             C4
                ADE
ATOM
       1300
                        71
                                -11.402 -26.514
                                                  3.900 12.01 0.55
ATOM
       1301
             C3,
                 ADE
                        71
                                -10.178 -25.915
                                                 -0.729 12.01
                                                               0.23
            Н3'
                 ADE
ATOM
       1302
                        71
                                -9.368 -25.921
                                                 -1.460 1.01
                                                               0.03
ATOM
       1303
            C2' ADE
                         71
                                 -9.684 - 26.080
                                                  0.702 12.01 -0.31
ATOM
       1304 H2' 1 ADE
                        71
                                 -8.942 -26.874
                                                  0.712 1.01 0.08
ATOM
       1305 H2' 2 ADE
                                 -9.276 -25.201
                         71
                                                  1.174 1.01
                                                               0.08
ATOM
       1306
             03' ADE
                         71
                                -10.927 -24.730
                                                 -0.872 16.00 -0.51
ATOM
       1307
             P
                 GUA
                                -10.235 -23.283
                        72
                                                 -1.044 30.97 1.39
ATOM
       1308
             OP1 GUA
                        72
                                 -8.987 -23.231
                                                 -0.240 16.00 -0.85
             OP2 GUA
ATOM
       1309
                         72
                                -10.212 -22.923
                                                 -2.477 16.00 -0.85
ATOM
       1310
            05' GUA
                        72
                                -11.324 -22.380
                                                 -0.296 16.00 -0.51
ATOM
       1311 C5' GUA
                         72
                                -12.682 -22.364
                                                 -0.693 12.01 0.12
ATOM
       1312 H5' 1 GUA
                         72
                                -12.807 -21.740
                                                -1.579 1.01 0.02
       1313 H5' 2 GUA
                         72
ATOM
                                -13.032 -23.371
                                                 -0.920 1.01
                                                               0.02
ATOM
       1314 C4'
                 GUA
                         72
                                -13.534 -21.836
                                                  0.464 12.01
                                                               0.04
                 GUA
ATOM
       1315 H4'
                         72
                                -14.587 -21.925
                                                  0.193 1.01 0.06
ATOM
       1316 04'
                 GUA
                         72
                                -13.259 -22.606
                                                  1.629 16.00 -0.37
       1317 C1' GUA
ATOM
                         72
                                -12.804 -21.775
                                                  2.680 12.01 0.38
ATOM
       1318 H1'
                 GUA
                                -13.655 -21.460
                         72
                                                  3.286 1.01 0.01
ATOM
       1319
             N9
                 GUA
                         72
                                -11.770 -22.463
                                                  3.493 14.01 -0.04
ATOM
       1320
             С8
                 GUA
                         72
                                -10.594 -23.030
                                                  3.076 12.01 0.27
ATOM
       1321
             Н8
                 GUA
                         72
                                -10.306 -23.079
                                                  2.042 1.01 0.05
       1322
                 GUA
                                -9.827 -23.477
ATOM
             N7
                         72
                                                  4.031 14.01 -0.54
ATOM
       1323
             C5
                 GUA
                         72
                                -10.573 -23.226
                                                  5.181 12.01 -0.06
       1324
             C6
                 CUA
                                -10.288 -23.517
ATOM
                         72
                                                  6.551 12.01 0.69
ATOM
       1325
            06
                 GUA
                         72
                                 -9.273 -24.031
                                                  7.019 16.00 -0.46
```

					(492)	村開乙(
	981					982
ATOM	1326		GUA	72	-11.327 -23.158	
ATOM	1327		GUA	72	-11.202 -23.378	8.386 1.01 0.34
ATOM	1328		GUA	72	-12.511 -22.578	6.989 12.01 0.87
ATOM	1329		GUA	72	-13.399 -22.231	7.920 14.01 -0.78
ATOM	1330	H21	GUA	72	-13.213 -22.367	8.900 1.01 0.33
ATOM	1331	H22	GUA	72	-14.262 -21.796	7.631 1.01 0.34
ATOM	1332	N3	GUA	72	-12.770 -22.279	5.709 14.01 -0.71
ATOM	1333	C4	GUA	72	-11.773 -22.633	4.857 12.01 0.39
ATOM	1334	C3,	GUA	72	-13.199 -20.383	0.811 12.01 0.23
ATOM	1335	Н3'	GUA	72	-12.746 -19.865	-0.035 1.01 0.03
ATOM	1336	C2'	GUA	72	-12.211 -20.568	1.958 12.01 -0.31
ATOM	1337	H2' 1	GUA	72	-11.218 -20.789	1.569 1.01 0.08
ATOM	1338	H2' 2	GUA	72	-12.166 -19.688	2.586 1.01 0.08
ATOM	1339	03'	GUA	72	-14.385 -19.717	1.208 16.00 -0.51
ATOM	1340	P	GUA	73	-14.405 -18.152	1.603 30.97 1.39
ATOM	1341	0P1		73	-13.129 -17.539	1.171 16.00 -0.85
ATOM	1342	0P2		73	-15.689 -17.577	1.149 16.00 -0.85
ATOM	1343	05'	GUA	73	-14.413 -18.206	3.211 16.00 -0.51
ATOM	1344			73	-15.547 -18.671	3.919 12.01 0.12
ATOM		H5' 1		73	-16.417 -18.060	3.674 1.01 0.02
ATOM		H5' 2		73	-15.752 -19.706	3.643 1.01 0.02
ATOM	1347	C4'		73	-15.305 -18.599	5.428 12.01 0.04
ATOM	1348		GUA	73	-16.183 -18.995	5.940 1.01 0.06
ATOM	1349		GUA	73	-14.172 -19.382	5.768 16.00 -0.37
ATOM	1350		GUA	73	-13.368 -18.664	6.678 12.01 0.38
ATOM	1351	H1'	GUA	73	-13.784 -18.739	7.683 1.01 0.01
ATOM	1352	N9	GUA	73	-11.973 -19.154	6.625 14.01 -0.04
ATOM	1353		GUA	73 73	-11.138 -19.249	5.541 12.01 0.27
			GUA	73	-11.138 -19.249	4.561 1.01 0.05
ATOM	1354			73	-9.993 -19.822	5.786 14.01 -0.54
ATOM ATOM	1355		GUA		-10.065 -20.112	7.142 12.01 -0.06
ATOM	1356 1357		GUA GUA	73 73	-9.114 -20.752	7.142 12.01 -0.00
						7.665 16.00 -0.46
ATOM	1358		GUA	73	-7.999 -21.160	
ATOM	1359		GUA	73	-9.573 -20.894 -8.948 -21.363	9.291 14.01 -0.73 9.936 1.01 0.34
ATOM	1360		GUA	73 72		
ATOM	1361		GUA	73	-10.803 -20.451	9.740 12.01 0.87
ATOM	1362		GUA	73	-11.083 -20.573	11.039 14.01 -0.78
ATOM	1363		GUA	73	-10.416 -20.957	11.690 1.01 0.33
ATOM	1364		GUA	73 73	-11.968 -20.223	
ATOM	1365		GUA	73 73	-11.693 -19.841	8.950 14.01 -0.71
ATOM	1366		GUA	73	-11.268 -19.705	7.666 12.01 0.39
ATOM	1367		GUA	73	-15.008 -17.173	5.928 12.01 0.23
ATOM	1368		GUA	73	-15.269 -16.420	5.182 1.01 0.03
ATOM	1369		GUA	73	-13.498 -17.237	6.159 12.01 -0.31
ATOM		H2'1		73	~12.982 -17.118	5.206 1.01 0.08
ATOM		H2' 2		73 70	-13.138 -16.499	6.873 1.01 0.08
ATOM	1372		GUA	73	-15.743 -16.957	7.122 16.00 -0.51
ATOM	1373		GUA	74	-15.724 -15.554	7.920 30.97 1.39
ATOM	1374		GUA	74	-14.929 -14.571	7.151 16.00 -0.85
ATOM	1375	0P2	GUA	74	-17.112 -15.228	8.315 16.00 -0.85

```
983
                                                                984
ATOM
       1376 05' GUA
                        74
                               -14.897 -15.943
                                                 9.248 16.00 -0.51
ATOM
       1377 C5' GUA
                        74
                               -15.451 -16.814 10.218 12.01 0.12
ATOM
       1378 H5' 1 GUA
                        74
                               -16.386 -16.399
                                                10.597 1.01 0.02
       1379 H5' 2 GUA
ATOM
                        74
                               -15.656 -17.785
                                                 9.764 1.01 0.02
ATOM
       1380 C4' GUA
                               -14.493 -17.013 11.396 12.01 0.04
                        74
ATOM
       1381 H4'
                GUA
                               -14.962 -17.694 12.110 1.01 0.06
                        74
ATOM
       1382 04'
                 GUA
                               -13.282 -17.588
                                                10.935 16.00 -0.37
                        74
ATOM
       1383 C1' GUA
                        74
                               -12.181 -16.899 11.489 12.01 0.38
ATOM
       1384
            H1'
                 GUA
                        74
                               -11.955 -17.286
                                               12.483 1.01 0.01
            N9
ATOM
       1385
                 GUA
                        74
                               -11.027 -17.003
                                                10.571 14.01 -0.04
            68
                 GUA
ATOM
       1386
                        74
                               -10.963 -16.636
                                                 9.250 12.01 0.27
ATOM
       1387
             Н8
                 GUA
                        74
                               -11.775 -16.143
                                                 8.739 1.01 0.05
ATOM
       1388
            N7
                 GUA
                        74
                                -9.843 -16.941
                                                 8.660 14.01 -0.54
ATOM
       1389
             C5
                 GUA
                                -9.106 -17.564
                        74
                                                 9.659 12.01 -0.06
ATOM
       1390
            C6
                 GUA
                                -7.823 -18.177
                        74
                                                 9.595 12.01 0.69
ATOM
       1391
             06
                 GUA
                        74
                                -7.096 -18.288
                                                 8.612 16.00 -0.46
ATOM
       1392
            N1
                 GUA
                        74
                                -7.425 -18.718
                                                10.812 14.01 -0.73
ATOM
       1393
             H1
                 GUA
                        74
                                -6.523 -19.181
                                                10.829 1.01 0.34
ATOM
       1394
             C2
                 GUA
                        74
                                -8.193 -18.699
                                                11.958 12.01 0.87
             N2
                 GUA
ATOM
       1395
                        74
                                -7.659 -19.213
                                                13.068 14.01 -0.78
             H21 GUA
ATOM
       1396
                        74
                                -6.721 -19.573
                                                13.079 1.01 0.33
             H22 GUA
ATOM
       1397
                        74
                                -8.204 -19.202
                                                13.918 1.01 0.34
             N3
                 GUA
ATOM
       1398
                        74
                                -9.409 -18.140
                                                12.017 14.01 -0.71
             C4
                 GUA
ATOM
       1399
                        74
                                -9.814 -17.596
                                                10.837 12.01 0.39
       1400 C3'
                GUA
ATOM
                        74
                               -14.115 -15.701
                                                12.102 12.01 0.23
ATOM
       1401 H3'
                 GUA
                               -14.773 -14.879
                        74
                                                11.818 1.01
       1402 C2'
                GUA
ATOM
                        74
                               -12.699 -15.468 11.582 12.01 -0.31
ATOM
       1403 H2'1 GUA
                        74
                               -12.762 -15.007 10.597 1.01 0.08
ATOM
       1404 H2' 2 GUA
                        74
                               -12.096 -14.848
                                               12.243 1.01 0.08
ATOM
       1405 03' GUA
                               -14.173 -15.905
                                               13.503 16.00 -0.51
                        74
ATOM
       1406 P
                 THY
                        75
                               -13.842 -14.741 14.573 30.97 1.39
ATOM
       1407
             OP1 THY
                               -13.761 -13.444 13.864 16.00 -0.85
                        75
ATOM
       1408 OP2 THY
                        75
                               -14.757 -14.896
                                               15.725 16.00 -0.85
       1409 05' THY
ATOM
                        75
                               -12.360 -15.153
                                                15.045 16.00 -0.51
ATOM
       1410 C5' THY
                        75
                               -12.144 -16.350
                                                15.768 12.01 0.12
ATOM
       1411 H5' 1 THY
                        75
                               -12.653 -16.302
                                                16.732 1.01 0.02
ATOM
       1412 H5' 2 THY
                        75
                               -12.534 -17.198
                                                15.204 1.01 0.02
       1413 C4' THY
                                                              0.04
ATOM
                        75
                               -10.649 -16.573
                                                16.000 12.01
ATOM
       1414
             H4'
                 THY
                        75
                               -10.512 -17.533
                                                16.500 1.01
                                                             0.06
ATOM
       1415
             04'
                 THY
                        75
                                -9.977 -16.604
                                                14.754 16.00 -0.37
                 THY
ATOM
       1416
             C1'
                        75
                                -8.717 -15.991
                                                14.901 12.01 0.38
       1417 H1'
                 THY
ATOM
                        75
                                -8.057 -16.668
                                                15.444 1.01 0.01
ATOM
       1418
             N1
                 THY
                                -8.184 -15.584
                                                13.572 14.01 -0.22
                        75
             6
                 THY
ATOM
       1419
                        75
                                -8.949 -14.821
                                                12.717 12.01 0.03
ATOM
       1420
             Н6
                 THY
                        75
                                -9.934 -14.505 13.032 1.01 0.13
ATOM
       1421
             C5
                THY
                        75
                                -8.510 -14.511
                                                11.471 12.01 -0.18
       1422
             C7 THY
ATOM
                        75
                                -9.426 -13.627
                                                10.645 12.01 -0.38
ATOM
       1423
             H71 THY
                        75
                                -9.586 -12.678
                                                11.158 1.01
                                                              0.11
             H72 THY
ATOM
       1424
                                -8.979 -13.426
                                                 9.671 1.01
ATOM
       1425 H73 THY
                        75
                               -10.386 -14.118 10.492 1.01 0.11
```

```
985
                                                                986
       1426 C4 THY
ATOM
                        75
                                -7.240 -14.996 10.971 12.01 0.81
ATOM
       1427 04
                THY
                        75
                                -6.793 -14.820
                                                9.841 16.00 -0.46
ATOM
      1428 N3
                 THY
                        75
                                -6.523 -15.737 11.893 14.01 -0.85
ATOM
       1429
           НЗ
                 THY
                        75
                                -5.637 -16.125 11.590 1.01 0.35
ATOM
       1430 C2
                THY
                        75
                                -6.924 -16.042 13.185 12.01 0.85
       1431 02
                THY
ATOM
                        75
                                -6.179 -16.687 13.920 16.00 -0.49
       1432 C3'
                THY
ATOM
                        75
                                -9.982 -15.458 16.825 12.01 0.23
       1433 H3' THY
                               -10.714 -14.748 17.213 1.01 0.03
ATOM
                        75
ATOM
       1434 C2' THY
                        75
                                -9.066 -14.801 15.790 12.01 -0.31
       1435 H2' 1 THY
ATOM
                        75
                                -9.641 -14.048 15.251 1.01 0.08
ATOM
       1436 H2' 2 THY
                        75
                                -8.182 -14.347
                                                16.230 1.01 0.08
ATOM
       1437 03' THY
                        75
                                -9.268 -16.056
                                               17.894 16.00 -0.51
ATOM
       1438 P
                 THY
                        76
                                -8.470 -15.200
                                                19.010 30.97 1.39
ATOM
       1439
            OP1 THY
                        76
                                -8.665 -13.756 18.750 16.00 -0.85
       1440 OP2 THY
ATOM
                        76
                                -8.785 -15.761
                                                20.342 16.00 -0.85
       1441 05' THY
ATOM
                        76
                                -6.944 -15.568
                                                18.657 16.00 -0.51
       1442 C5' THY
ATOM
                        76
                                -6.460 -16.886
                                                18.836 12.01 0.12
       1443 H5' 1 THY
                                                19.893 1.01
ATOM
                                -6.481 -17.152
                                                              0.02
                        76
ATOM
       1444 H5' 2 THY
                        76
                                -7.090 -17.586
                                                18.283 1.01
                                                              0.02
       1445 C4' THY
ATOM
                                -5.030 -17.008
                                                18.307 12.01
                                                             0.04
                        76
ATOM
       1446 H4' THY
                        76
                                -4.725 -18.052
                                                18.380 1.01 0.06
                THY
                                                16.948 16.00 -0.37
ATOM
       1447
             04'
                                -5.005 -16.606
                        76
ATOM
       1448 C1'
                 THY
                        76
                                -3.915 -15.740
                                                16.722 12.01 0.38
ATOM
       ,1449
             H1'
                 THY
                        76
                                -3.015 -16.339
                                                16.584 1.01 0.01
       1450
             N1
                 THY
                        76
                                -4.219 -14.863
                                                15.555 14.01 -0.22
ATOM
                 THY
ATOM
       1451
             63
                        76
                                -5.275 -13.980
                                                15.601 12.01 0.03
       1452 H6
                 THY
                                -5.875 -13.926
ATOM
                        76
                                                16.497 1.01 0.13
       1453
             C5
                 THY
                                -5.620 -13.236
                                                14.520 12.01 -0.18
ATOM
                        76
             C7 THY
                        76
                                -6.781 -12.271
                                                14.685 12.01 -0.38
ATOM
       1454
             H71 THY
                                -7.658 -12.665
                                                              0.11
ATOM
       1455
                                               14.173 1.01
                        76
             H72 THY
ATOM
       1456
                        76
                                -7.027 -12.104
                                                15.734 1.01
                                                              0.11
             H73 THY
                                -6.514 -11.314 14.236 1.01
ATOM
       1457
                        76
                                                              0.11
ATOM
             C4 THY
                                -4.915 -13.361 13.263 12.01 0.81
       1458
                        76
ATOM
       1459
             04
                 THY
                                -5.183 -12.748 12.234 16.00 -0.46
                        76
ATOM
       1460
             N3
                 THY
                                -3.884 -14.286
                                                13.282 14.01 -0.85
                        76
ATOM
       1461
             Н3
                 THY
                                -3.358 -14.419
                                                12.425 1.01 0.35
                        76
ATOM
       1462
             C2
                THY
                        76
                                -3.491 -15.041 14.376 12.01 0.85
             02
                THY
ATOM
       1463
                        76
                                -2.543 -15.817 14.277 16.00 -0.49
             C3'
                 THY
                                -4.024 -16.116
ATOM
       1464
                        76
                                                 19.052 12.01 0.23
       1465
             Н3'
                THY
                                -4.442 -15.738
                                                19.987 1.01 0.03
ATOM
                        76
       1466 C2' THY
                                -3.795 -14.985
ATOM
                        76
                                                18.047 12.01 -0.31
       1467 H2' 1 THY
                                -4.587 -14.253
                                                 18.188 1.01 0.08
ATOM
                        76
ATOM
       1468 H2' 2 THY
                                -2.829 -14.493
                                                 18.154 1.01 0.08
                        76
ATOM
       1469
             03' THY
                        76
                                -2.863 -16.886
                                                 19.315 16.00 -0.51
ATOM
       1470
            P
                 ADE
                        77
                                -1.597 -16.310
                                                 20.131 30.97 1.39
            OP1 ADE
ATOM
       1471
                        77
                                -2.040 -15.243
                                                21.053 16.00 -0.85
ATOM
       1472
             OP2 ADE
                        77
                                -0.835 -17.459
                                                 20.672 16.00 -0.85
       1473 05' ADE
                                -0.706 -15.652
ATOM
                        77
                                                 18.971 16.00 -0.51
ATOM
       1474 C5' ADE
                         77
                                -0.114 - 16.489
                                                 18.005 12.01 0.12
       1475 H5' 1 ADE
                        77
                                 0.658 -17.108 18.466 1.01 0.02
ATOM
```

```
987
                                                                 988
ATOM
       1476 H5' 2 ADE
                        77
                                -0.887 -17.131 17.588 1.01 0.02
ATOM
       1477 C4' ADE
                        77
                                 0.498 -15.704 16.852 12.01 0.04
ATOM
       1478 H4'
                 ADE
                        77
                                 0.855 - 16.431
                                                16.124 1.01 0.06
ATOM
       1479 04'
                 ADE
                        77
                                -0.445 -14.904 16.185 16.00 -0.37
ATOM
       1480 C1'
                 ADE
                        77
                                 0.310 -13.991 15.427 12.01 0.38
                 ADE
ATOM
       1481 H1'
                        77
                                 0.864 -14.517 14.648 1.01 0.01
ATOM
       1482
            N9
                 ADE
                        77
                                -0.582 -12.973 14.843 14.01 -0.07
ATOM
       1483
             68
                 ADE
                        77
                                -1.707 -12.405 15.390 12.01 0.26
ATOM
       1484
             Н8
                 ADE
                        77
                                -1.991 -12.538 16.423 1.01 0.06
                 ADE
ATOM
       1485
             N7
                        77
                                -2.436 -11.738 14.539 14.01 -0.54
ATOM
       1486
            C5
                 ADE
                        77
                                -1.728 -11.852 13.348 12.01 -0.10
                 ADE
ATOM
       1487
             60
                        77
                                -1.973 -11.404 12.036 12.01 0.77
ATOM
       1488
             N6
                 ADE
                        77
                                -3.078 -10.738 11.701 14.01 -0.77
ATOM
             H61 ADE
       1489
                        77
                                -3.246 -10.482 10.737 1.01 0.32
ATOM
             H<sub>62</sub> ADE
       1490
                        77
                                -3.790 -10.589
                                               12.401 1.01 0.34
ATOM
       1491
             N1
                 ADE
                        77
                                -1.051 -11.649 11.087 14.01 -0.77
ATOM
       1492
             C2
                 ADE
                        77
                                 0.048 -12.325 11.412 12.01 0.66
ATOM
       1493
             Н2
                 ADE
                        77
                                 0.743 - 12.508
                                                10.607 1.01 -0.03
                 ADE
ATOM
       1494
             N3
                        77
                                 0.368 - 12.849
                                                12.591 14.01 -0.73
       1495
                 ADE
ATOM
             C4
                        77
                                -0.573 -12.566 13.532 12.01 0.55
       1496
             C3' ADE
                        77
ATOM
                                 1.649 -14.760
                                                17.228 12.01 0.23
             Н3'
ATOM
       1497
                 ADE
                                 1.702 -14.594
                        77
                                                18.304 1.01 0.03
       1498 C2'
                ADE
ATOM
                        77
                                 1.266 -13.466
                                                16.494 12.01 -0.31
ATOM
       1499 H2' 1 ADE
                        77
                                 0.733 - 12.805
                                                17.179 1.01 0.08
ATOM
       1500 H2' 2 ADE
                        77
                                 2.121 -12.948
                                                16.062 1.01 0.08
       1501 03'
ATOM
                 ADE
                        77
                                 2.816 -15.383
                                                16.724 16.00 -0.51
ATOM
       1502 P
                 GUA
                                 4.312 -14.951
                        78
                                                17.118 30.97 1.39
       1503 OP1 GUA
ATOM
                                 4.314 -14.488
                                                18.523 16.00 -0.85
                        78
ATOM
       1504 OP2 GUA
                        78
                                 5.196 -16.065
                                                16.701 16.00 -0.85
ATOM
       1505 05' GUA
                                 4.578 -13.698
                        78
                                                16.143 16.00 -0.51
ATOM
       1506 C5' GUA
                                 4.921 -13.913
                        78
                                                14.789 12.01 0.12
ATOM
       1507 H5' 1 GUA
                                  5.950 -14.269
                                                14.727 1.01 0.02
                        78
ATOM
       1508 H5' 2 GUA
                        78
                                  4.259 -14.665
                                                14.363 1.01 0.02
ATOM
       1509
             C4' GUA
                                  4.771 -12.649
                        78
                                                13.941 12.01 0.04
ATOM
       1510 H4'
                 GUA
                        78
                                  5.056 -12.905
                                                12.919 1.01 0.06
ATOM
       1511
             04'
                 GUA
                        78
                                  3.435 -12.197
                                                13.897 16.00 -0.37
ATOM
       1512
             C1' GUA
                        .78
                                  3.488 -10.902
                                                13.349 12.01 0.38
       1513 H1' GUA
ATOM
                         78
                                  3.801 -10.948
                                                12.304 1.01 0.01
ATOM
       1514
             N9
                 GUA
                        78
                                  2.193 -10.204
                                                13.497 14.01 -0.04
       1515
                 GUA
ATOM
             С8
                        78
                                 1.436 -10.030
                                                14.628 12.01 0.27
ATOM
       1516
             Н8
                 GUA
                                  1.748 -10.388
                                                15.599 1.01 0.05
                        78
                 GUA
ATOM
       1517
             N7
                        78
                                 0.307 - 9.409
                                                14.424 14.01 -0.54
ATOM
       1518
                 GUA
                                 0.312 -9.145 13.057 12.01 -0.06
             С5
                        78
ATOM
       1519
             60
                 GUA
                        78
                                 -0.664 -8.506
                                                12.230 12.01 0.69
ATOM
       1520
             06
                 GUA
                         78
                                 -1.739
                                        -8.010
                                                12.559 16.00 -0.46
ATOM
       1521
             N1
                 GUA
                        78
                                 -0.297 -8.489
                                                 10.889 14.01 -0.73
ATOM
       1522
             H1
                 GUA
                                 -0.955
                                        -8.084
                                                 10.232 1.01 0.34
                         78
ATOM
       1523
             C2
                 GUA
                         78
                                 0.876 - 9.020
                                                 10.396 12.01 0.87
ATOM
             N2
                 GUA
                                 1.102 -8.896
       1524
                         78
                                                  9.090 14.01 -0.78
ATOM
       1525 H21 GUA
                                 0.455 - 8.395
                                                  8.507 1.01 0.33
                         78
```

	989					990
ATOM	1526 H22	GUA	78	1.931	-9.309	8.690 1.01 0.34
ATOM	1527 N3	GUA	78	1.800	-9.606	11.166 14.01 -0.71
ATOM	1528 C4	GUA	78	1.460	-9.638	12.482 12.01 0.39
ATOM	1529 C3'	GUA	78	5.587	-11.428	14.396 12.01 0.23
ATOM	1530 H3'	GUA	78	5.857	-11.482	15.450 1.01 0.03
ATOM	1531 C2'	GUA	78		-10.275	14.197 12.01 -0.31
ATOM	1532 H2' 1		78	4.187	-9.991	15.171 1.01 0.08
ATOM	1533 H2' 2		78	5.013	-9.401	13.709 1.01 0.08
ATOM	1534 03'	GUA	78		-11.375	13.589 16.00 -0.51
ATOM	1535 P	GUA	79		-10.138	13.595 30.97 1.39
ATOM	1536 OP1		79	7.667	-9.415	14.880 16.00 -0.85
ATOM		GUA	79		-10.638	13.150 16.00 -0.85
ATOM	1538 05'	GUA	79	7.178	-9.217	12.423 16.00 -0.51
ATOM	1539 C5'	GUA	79	7.090	-9.702	11.096 12.01 0.12
ATOM	1540 H5' 1		79	8.090	-9.839	10.684 1.01 0.02
ATOM	1540 H5' 2		79		-10.659	11.083 1.01 0.02
ATOM	1541 H5 2	GUA	79	6.307	-8.725	10.216 12.01 0.04
ATOM	1543 H4'	GUA	79	6.193	-9.166	9.224 1.01 0.06
ATOM	1544 04'	GUA	79	5.017	-8.499	10.755 16.00 -0.37
ATOM	1545 C1'	GUA	79	4.634	-7.178	10.449 12.01 0.38
ATOM	1546 H1'	GUA	79	4.363	-7.094	9.395 1.01 0.01
ATOM	1540 III 1547 N9	GUA	79	3.539	-6.743	11.345 14.01 -0.04
ATOM	1547 N3	GUA	79	3.472	-6.843	12.711 12.01 0.27
ATOM	1549 H8	GUA	79 79	4.280	-7.243	13.309 1.01 0.05
ATOM	1549 NO	GUA	79 79	2.350	-6.422	13.224 14.01 -0.54
	1550 N7	GUA	79 79	1.614	-6.006	12.120 12.01 -0.06
ATOM ATOM	1551 C5 1552 C6	GUA	79 79	0.293	-5.471	12.040 12.01 0.69
ATOM	1553 06	GUA	79	-0.486	-5.225	12.958 16.00 -0.46
ATOM	1554 N1	GUA	79 79	-0.400	-5.233	10.731 14.01 -0.73
ATOM	1555 H1	GUA	79 79	-1.059	-4.906	10.600 1.01 0.34
ATOM	1556 C2	GUA	79 79	0.679	-5.456	9.621 12.01 0.87
ATOM	1550 C2	GUA	79	0.079	-5.149	8.430 14.01 -0.78
ATOM		GUA	79	-0.752	-4.736	8.355 1.01 0.33
ATOM		GUA	79	0.706	-5.330	7.600 1.01 0.34
ATOM	1560 N3	GUA	79	1.928	-5.937	9.691 14.01 -0.71
ATOM	1561 C4	GUA	79	2.334	-6.200	10.964 12.01 0.39
ATOM	1562 C3'	GUA	79	6.971	-7.343	10.095 12.01 0.23
ATOM	1563 H3'	GUA	79	7.910	-7.297	10.647 1.01 0.03
ATOM	1564 C2'		79	5.927	-6.425	10.736 12.01 -0.31
ATOM	1565 H2' 1		79	6.103	-6.387	11.812 1.01 0.08
ATOM	1566 H2' 2		79	5.922	-5.419	10.320 1.01 0.08
ATOM	1567 03'		79	7.199	-7.083	8.719 16.00 -0.51
ATOM	1568 P	GUA	80	7.919	-5.739	8.188 30.97 1.39
ATOM		GUA	80	8.674	-5.123	9.302 16.00 -0.85
ATOM		GUA	80	8.607	-6.053	6.916 16.00 -0.85
ATOM	1571 05'		80	6.655	-4.802	7.854 16.00 -0.51
ATOM	1572 C5'		80	5.787	-5.113	6.781 12.01 0.12
ATOM	1572 °C3		80	6.337	-5.088	5.839 1.01 0.02
ATOM	1574 H5' 2		80	5.365	-6.110	6.919 1.01 0.02
ATOM	1574 IIS 2		80	4.645	-4.098	6.715 12.01 0.04
11 UM	1010 04	JUN	00	7.043	1.000	0.710 12.01 0.04

ATOM GUA 1577 04' 80 ATOM 1578 C1' GUA 80 H1' GUA ATOM 1579 80 ATOM 1580 N9 **GUA** 80 GUA ATOM 1581 68 80 ATOM 1582 Н8 **GUA** 80 GUA ATOM 1583 N7 80 ATOM 1584 C5 GUA 80 GUA ATOM 1585 6 80 ATOM 1586 06 GUA 80 N1 GUA ATOM 1587 80 ATOM H1 GUA 1588 80 GUA ATOM 1589 C280 ATOM 1590 N2 GUA 80 H21 GUA ATOM 1591 80 1592 H22 GUA -1.528 -1.553 ATOM 80 8.329 1.01 0.34 1593 N3 GUA 0.707 - 2.094ATOM 80 9.290 14.01 -0.71 ATOM 1594 C4 GUA 80 1.771 -2.429 10.069 12.01 0.39 ATOM 1595 C3' GUA 5.133 -2.643 80 6.599 12.01 0.23 ATOM 1596 H3' GUA 80 6.208 - 2.5696.430 1.01 0.03 ATOM 1597 C2' GUA 4.738 -2.050 80 7.948 12.01 -0.31 ATOM 1598 H2'1 GUA 80 5.508 -2.2808.685 1.01 0.08 1599 H2' 2 GUA ATOM 80 4.558 -0.9767.899 1.01 0.08 ATOM 1600 03' GUA 80 4.438 -1.9725.567 16.00 -0.51 ATOM 1601 HO3' GUA 4.683 -2.3714.729 1.01 0.31 80 ATOM 1602 HO5' CYT 81 -9.692-0.26814.346 1.01 0.28 ATOM 1603 05' CYT -9.2670.566 81 14.556 16.00 -0.40 ATOM 1604 C5' CYT 81 -9.095 1.304 13.364 12.01 0.12 ATOM 1605 H5' 1 CYT 81 -8.6862.282 13.618 1.01 0.02 ATOM 1606 H5' 2 CYT -10.06381 1.442 12.880 1.01 0.02 ATOM 1607 C4' CYT -8.1340.599 12.400 12.01 0.04 H4' CYT -7.942ATOM 1608 81 1.257 11.550 1.01 0.06 04' CYT -6.899ATOM 1609 81 0.312 13.023 16.00 -0.37 **ATOM** 1610 C1' CYT -6.239-0.61681 12.192 12.01 0.38 ATOM 1611 H1' CYT 81 -5.943-0.12211.266 1.01 0.01 ATOM 1612 N1 CYT -5.115 -1.284 12.893 14.01 -0.19 81 ATOM 1613 C6 CYT 81 -5.288-1.77414.163 12.01 0.18 ATOM 1614 Н6 CYT -6.234 - 1.62514.664 1.01 0.10 81 **ATOM** 1615 C5 CYT 81 -4.310 -2.45814.797 12.01 -0.58 ATOM Н5 CYT -4.511 -2.839 1616 81 15.785 1.01 0.15 ATOM 1617 C4 CYT 81 -3.071 -2.62814.091 12.01 0.93 ATOM 1618 N4 CYT 81 -2.051 -3.27814.655 14.01 -0.83 H41 CYT ATOM 1619 81 -2.131 -3.660 15.585 1.01 0.33 H42 CYT -1.188 -3.39314.133 1.01 ATOM 1620 0.35 ATOM 1621 N3 CYT -2.914 -2.15712.848 14.01 -0.86 81 C2 CYT -3.919 -1.495 12.211 12.01 0.86 ATOM 1622 81 02 CYT ATOM 1623 -3.756 -1.10711.056 16.00 -0.51 81 ATOM 1624 C3' CYT 81 -8.623 -0.762 11.883 12.01 0.23

991

ATOM

1576 H4' GUA

1625 H3' CYT

81

-9.325 -1.211 12.585 1.01 0.03

ATOM

```
993
                                                                 994
       1626 C2' CYT
ATOM
                        81
                                -7.350 -1.612 11.888 12.01 -0.31
ATOM
       1627 H2'1 CYT
                        81
                                -7.440 -2.378
                                                12.659 1.01 0.08
       1628 H2' 2 CYT
ATOM
                        81
                                -7.164 - 2.080
                                                10.931 1.01 0.08
       1629 03' CYT
ATOM
                        81
                                -9.198 - 0.606
                                                10.595 16.00 -0.51
       1630 P
ATOM
                 CYT
                        82
                                -9.790
                                       -1.853
                                                 9.750 30.97 1.39
       1631 OP1 CYT
ATOM
                        82
                               -10.039 -2.969
                                                10.690 16.00 -0.85
ATOM
       1632 OP2 CYT
                        82
                               -10.888 -1.349
                                                 8.897 16.00 -0.85
       1633 05' CYT
ATOM
                        82
                                -8.555
                                       -2.272
                                                 8.795 16.00 -0.51
       1634 C5' CYT
ATOM
                        82
                                -8.126
                                       -1.438
                                                 7.733 12.01 0.12
ATOM
       1635 H5' 1 CYT
                        82
                                -8.929
                                       -1.321
                                                 7.004 1.01 0.02
ATOM
       1636 H5' 2 CYT
                                -7.862 -0.456
                        82
                                                 8.128 1.01 0.02
ATOM
       1637 C4' CYT
                        82
                                -6.895 -2.031
                                                 7.032 12.01 0.04
ATOM
       1638 H4'
                 CYT
                        82
                                -6.543
                                       -1.324
                                                 6.279 1.01 0.06
ATOM
       1639
             04'
                 CYT
                                -5.866
                                       -2.232
                                                 7.981 16.00 -0.37
                        82
ATOM
       1640 C1'
                 CYT
                                -5.174
                                        -3.435
                                                 7.714 12.01 0.38
                        82
ATOM
       1641
            H1'
                 CYT
                        82
                                -4.402 -3.257
                                                 6.965 1.01 0.01
ATOM
       1642
             N1
                 CYT
                        82
                                -4.675 -3.974
                                                 9.003 14.01 -0.19
ATOM
       1643
             C6
                 CYT
                        82
                                -5.549 -4.095
                                                10.049 12.01 0.18
                 CYT
ATOM
       1644
             Н6
                                -6.585 -3.833
                                                 9.905 1.01
                        82
                                                              0.10
ATOM
       1645
             C5
                 CYT
                        82
                                -5.163 -4.551
                                                11.256 12.01 -0.58
                 CYT
             H5
                                -5.922 -4.603
                                                12.018 1.01
ATOM
       1646
                        82
                                                              0.15
ATOM
       1647
             C4
                 CYT
                        82
                                -3.783 -4.913
                                                11.397 12.01 0.93
ATOM
             N4
                 CYT
                                -3.349 -5.431
                                                12.547 14.01 -0.83
       1648
                        82
             H41 CYT
ATOM
       1649
                        82
                                -3.983 -5.558
                                                13.320 1.01 0.33
ATOM
       1650
             H42 CYT
                        82
                                -2.376 -5.701
                                                12.645 1.01 0.35
             N3 CYT
ATOM
       1651
                        82
                                -2.925 -4.799
                                                10.372 14.01 -0.86
             C2 CYT
                                -3.338 -4.340
ATOM
       1652
                        82
                                                 9.154 12.01 0.86
                 CYT
ATOM
       1653
             02
                        82
                                -2.542 -4.275
                                                 8.218 16.00 -0.51
             C3' CYT
                                -7.160 -3.394
ATOM
       1654
                        82
                                                  6.372 12.01 0.23
ATOM
       1655
             H3' CYT
                        82
                                -8.195 -3.695
                                                  6.531 1.01 0.03
ATOM
       1656
             C2' CYT
                                -6.260 -4.348
                                                  7.148 12.01 -0.31
                         82
ATOM
       1657 H2' 1 CYT
                        82
                                -6.866 -4.815
                                                  7.924 1.01 0.08
ATOM
       1658 H2' 2 CYT
                        82
                                 -5.832 -5.125
                                                  6.527 1.01 0.08
ATOM
             03' CYT
                                -6.830 -3.324
       1659
                        82
                                                  4.991 16.00 -0.51
       1660 P
                 CYT
                                 -7.049 -4.564
                                                  3.973 30.97 1.39
ATOM
                         83
ATOM
       1661
             OP1 CYT
                                 -8.004 -5.513
                                                  4.586 16.00 -0.85
                         83
             OP2 CYT
ATOM
       1662
                         83
                                 -7.321 -4.013
                                                  2.627 16.00 -0.85
             05' CYT
                                 -5.602 -5.274
ATOM
       1663
                         83
                                                  3.940 16.00 -0.51
             C5' CYT
                                 -4.503 -4.683
ATOM
       1664
                         83
                                                  3.269 12.01 0.12
ATOM
       1665 H5' 1 CYT
                                 -4.695
                                        -4.638
                                                  2.196 1.01
                                                               0.02
                         83
ATOM
       1666 H5' 2 CYT
                                 -4.346
                                        -3.671
                                                               0.02
                         83
                                                  3.646 1.01
ATÓM
       1667
             C4' CYT
                                 -3.235
                                        -5.507
                         83
                                                  3.523 12.01
                                                               0.04
ATOM
             H4' CYT
                         83
                                 -2.370 - 4.987
                                                  3.109 1.01 0.06
       1668
             04' CYT
                                 -3.058
ATOM
       1669
                                        -5.641
                                                  4.917 16.00 -0.37
                         83
ATOM
       1670
             C1' CYT
                         83
                                 -2.421
                                        -6.864
                                                  5.206 12.01 0.38
ATOM
       1671
             H1' CYT
                                 -1.347 -6.753
                         83
                                                  5.046 1.01 0.01
ATOM
       1672
             N1 CYT
                         83
                                 -2.802 -7.273
                                                  6.583 14.01 -0.19
                                 -4.121 -7.241
ATOM
       1673
             60
                 CYT
                         83
                                                  6.955 12.01 0.18
ATOM
       1674
             Н6
                 CYT
                         83
                                 -4.872 -7.035
                                                  6.209 1.01 0.10
       1675 C5 CYT
                                 -4.508 -7.473
                                                  8.227 12.01 -0.58
ATOM
                         83
```

					(499)		ानामा -	
	995							96
ATOM	1676		CYT	83	-5.561	-7.415	8.458 1.01 0.1	
ATOM	1677		CYT	83	-3.472	-7.756	9.177 12.01 0.9	
ATOM	1678		CYT	83	-3.787	-7.960	10.457 14.01 -0.8	
ATOM	1679	H41		83	-4.751	-7.920	10.749 1.01 0.3	3
ATOM	1680	H42	CYT	83	-3.057	-8.110	11.142 1.01 0.3	5
ATOM	1681	N3	CYT	83	-2.186	-7.838	8.803 14.01 -0.8	6
ATOM	1682	C2	CYT	83	-1.818	-7.621	7.505 12.01 0.8	6
ATOM	1683	02	CYT	83	-0.645	-7.749	7.164 16.00 -0.5	1
ATOM	1684	C3'	CYT	83	-3.303	-6.934	2.951 12.01 0.2	3
ATOM	1685	Н3'	CYT	83	-4.309	-7.151	2.592 1.01 0.0	3
ATOM	1686	C2'	CYT	83	-3.008	-7.816	4.166 12.01 -0.3	1
ATOM	1687	H2' 1	CYT	83	-3.952	-8.242	4.502 1.01 0.0	8
ATOM	1688	H2' 2	CYT	83	-2.307	-8.615	3.955 1.01 0.0	8
ATOM	1689	03'	CYT	83		~7.076	1.904 16.00 -0.5	1
ATOM	1690	P	THY	84	-2.172	-8.437	1.040 30.97 1.3	
ATOM	1691	0P1		84	-3.451	-9.185	1.019 16.00 -0.8	
ATOM	1692		THY	84	-1.512	-8.106	-0.240 16.00 -0.8	
ATOM	1693	05'	THY	84	-1.136	-9.316	1.900 16.00 -0.5	
ATOM	1694	C5'	THY	84	0.193	-8.878	2.118 12.01 0.1	
ATOM	1695			84	0.751	-8.877	1.183 1.01 0.0	
ATOM	1696			84	0.184	-7.864	2.521 1.01 0.0	
ATOM	1697	C4'	THY	84	0.880	-9.794	3.132 12.01 0.0	
ATOM	1698	H4'	THY	84	1.896	-9.439	3.311 1.01 0.0	
ATOM	1699	04'	THY	84	0.166	-9.732	4.349 16.00 -0.3	
ATOM	1700	C1'	THY	84		-10.960	5.021 12.01 0.3	
ATOM	1701	H1'	THY	84		-11.042	5.433 1.01 0.0	
ATOM	1702	N1	THY	84		-11.058	6.041 14.01 -0.2	
ATOM	1703	C6	THY	84		-10.915	5.671 12.01 0.0	
ATOM	1703	Н6	THY	84		-10.807	4.625 1.01 0.1	
ATOM	1705	C5	THY	84		-10.873	6.593 12.01 -0.1	
ATOM	1706	C7	THY			-10.764	6.072 12.01 -0.3	
ATOM	1707		THY	84		-9.983	6.619 1.01 0.1	
ATOM	1708		THY	84		-10.532	5.007 1.01 0.1	
ATOM	1709		THY	84		-11.713	6.241 1.01 0.1	
ATOM	1710	C4	THY	84		-10.951	8.008 12.01 0.8	
ATOM	1711	04	THY	84		-10.875		
ATOM	1712	N3	THY	84		-11.120	8.302 14.01 -0.8	
ATOM	1712	Н3	THY	84		-11.214	9.280 1.01 0.3	
ATOM	1714	C2	THY	84		-11.212	7.382 12.01 0.8	
ATOM	1715	02	THY	84		-11.440	7.755 16.00 -0.4	
ATOM	1716	C3'	THY	84		-11.281	2.731 12.01 0.2	
ATOM	1717	H3'	THY	84		-11.445	1.795 1.01 0.0	
ATOM	1718	C2'		84		-11.957	3.874 12.01 -0.3	
ATOM	1719			84		-11.937	3.561 1.01 0.0	
ATOM	1719			84		-12.049		
ATOM	1720	n2 2 03'		84		-12.940	4.151 1.01 0.0 2.602 16.00 -0.5	
ATOM	1721	03 P	ADE	85		-13.194	2.129 30.97 1.3	
ATOM	1723		ADE	85		-13.702	1.211 16.00 -0.8	
ATOM	1723		ADE	85		-13.184		
ATOM	1725	UO	ADE	85	2.314	-14.023	3.509 16.00 -0.5	11

	997				998	
ATOM		C5'	A DE	85	3.427 -13.732 4.603 12.01 0.12	
ATOM		H5' 1		85		
ATOM		H5' 2		85 85		
ATOM	1729					
			ADE	85 or		
ATOM	1730		ADE	85 or	3.757 -14.365 6.630 1.01 0.06	
ATOM	1731		ADE	85 05	1.766 -14.024 6.384 16.00 -0.37	
ATOM	1732		ADE	85 05	1.172 -15.093 7.090 12.01 0.38	
ATOM	1733		ADE	85	1.749 -15.346 7.982 1.01 0.01	
ATOM	1734		ADE	85	-0.238 -14.801 7.427 14.01 -0.07	
ATOM	1735		ADE	85	-1.238 -14.346 6.604 12.01 0.26	
ATOM	1736		ADE	85	-1.114 -14.228 5.538 1.01 0.06	
ATOM	1737	N7	ADE	85	-2.343 -14.036 7.223 14.01 -0.54	
ATOM	1738	C5	ADE	85	-2.062 -14.328 8.553 12.01 -0.10	
ATOM	1739	C6	ADE	85	-2.802 -14.191 9.743 12.01 0.77	
ATOM	1740	N6	ADE	85	-4.025 -13.662 9.766 14.01 -0.77	
ATOM	1741	H61		85	-4.528 -13.560 10.636 1.01 0.32	
ATOM	1742	H62		85	-4.430 -13.317 8.907 1.01 0.34	
ATOM	1743	N1	ADE	85	-2.263 -14.632 10.895 14.01 -0.77	
ATOM	1744	C2	ADE	85	-1.040 -15.159 10.870 12.01 0.66	
ATOM	1745	H2	ADE	85	-0.648 -15.483 11.822 1.01 -0.03	
ATOM	1746	N3	ADE	85	-0.222 -15.292 9.831 14.01 -0.73	
ATOM	1747	C4	ADE	85	-0.800 -14.849 8.682 12.01 0.55	
ATOM	1748	C3'	ADE	85	2.761 -15.995 5.613 12.01 0.23	
ATOM	1749	Н3'	ADE	85	2.901 -16.248 4.563 1.01 0.03	
ATOM	1750	C2 <b>'</b>	ADE	85	1.306 -16.195 6.052 12.01 -0.31	
ATOM	1751	H2'1	ADE	85	0.630 -15.995 5.222 1.01 0.08	
ATOM	1752	H2'2		85	1.109 -17.181 6.469 1.01 0.08	
ATOM	1753	03'	ADE	85	3.664 -16.743 6.400 16.00 -0.51	
ATOM	1754	P	ADE	86	3.787 -18.339 6.251 30.97 1.39	
ATOM	1755	0P1	ADE	86	2.980 -18.759 5.082 16.00 -0.85	
ATOM	1756	OP2	ADE	86	5.225 -18.684 6.316 16.00 -0.85	
ATOM	1757	05'	ADE	86	3.063 -18.892 7.574 16.00 -0.51	
ATOM	1758	C5'	ADE	86	3.665 -18.717 8.836 12.01 0.12	
ATOM	1759	H5' 1	ADE	86	4.568 -19.320 8.891 1.01 0.02	
ATOM	1760	H5'2	ADE	86	3.923 -17.667 8.981 1.01 0.02	
ATOM	1761	C4'	ADE	86	2.729 -19.141 9.963 12.01 0.04	
ATOM	1762	H4'	ADE	86	3.226 -18.889 10.893 1.01 0.06	
ATOM	1763	04'	ADE	86	1.507 -18.434 9.893 16.00 -0.37	
ATOM	1764	C1'	ADE	86	0.438 -19.313 10.166 12.01 0.38	
ATOM	1765	H1'	ADE	86	0.316 -19.440 11.242 1.01 0.01	
ATOM	1766	N9	ADE	86	-0.784 -18.766 9.538 14.01 -0.07	
ATOM	1767	C8	ADE	86	-1.004 -18.496 8.209 12.01 0.26	
ATOM	1768	Н8	ADE	86	-0.296 -18.744 7.434 1.01 0.06	
ATOM	1769	N7	ADE	86	-2.129 -17.886 7.962 14.01 -0.54	
ATOM	1770	C5	ADE	86	-2.705 -17.754 9.217 12.01 -0.10	
ATOM	1771	C6	ADE	86	-3.914 -17.182 9.650 12.01 0.77	
ATOM	1772	N6	ADE	86	-4.765 -16.601 8.803 14.01 -0.77	
ATOM	1773	H61	ADE	86	-5.612 -16.162 9.139 1.01 0.32	
ATOM	1774	H62	ADE	86	-4.550 -16.609 7.817 1.01 0.34	
ATOM	1775	N1	ADE	86	-4.188 -17.168 10.966 14.01 -0.77	

```
999
                                                                1000
ATOM
       1776 C2 ADE
                        86
                                -3.303 -17.693 11.809 12.01 0.66
ATOM
       1777 H2
                 ADE
                        86
                                -3.596 -17.696
                                                12.847 1.01 -0.03
ATOM
      1778 N3
                 ADE
                        86
                                -2.128 -18.260
                                                11.536 14.01 -0.73
                 ADE
ATOM
       1779 C4
                        86
                                -1.887 -18.266
                                                10.193 12.01 0.55
ATOM
       1780 C3'
                ADE
                        86
                                 2.381 -20.634
                                                 9.988 12.01 0.23
ATOM
       1781 H3'
                 ADE
                        86
                                 3.020 -21.208
                                                 9.316 1.01 0.03
ATOM
       1782 C2' ADE
                        86
                                 0.923 - 20.620
                                                 9.535 12.01 -0.31
       1783 H2' 1 ADE
ATOM
                        86
                                 0.888 - 20.567
                                                 8.447 1.01 0.08
ATOM
       1784 H2' 2 ADE
                        86
                                 0.377 - 21.493
                                                 9.887 1.01 0.08
       1785 03' ADE
                                 2.538 -21.049
ATOM
                        86
                                                11.334 16.00 -0.51
ATOM
       1786 P
                 CYT
                        87
                                 2.581 -22.588
                                                11.802 30.97 1.39
ATOM
       1787 OP1 CYT
                                 2.648 -23.465
                        87
                                                10.609 16.00 -0.85
ATOM
       1788 OP2 CYT
                        87
                                 3.632 -22.669
                                                12.841 16.00 -0.85
ATOM
            05' CYT
       1789
                                 1.142 -22.767
                                                12.500 16.00 -0.51
                        87
ATOM
       1790 C5' CYT
                        87
                                 0.919 -22.293
                                                13.814 12.01 0.12
ATOM
       1791 H5' 1 CYT
                        87
                                 1.353 -22.985
                                                14.537 1.01 0.02
ATOM
       1792 H5' 2 CYT
                        87
                                 1.400 -21.323
                                                13.928 1.01 0.02
ATOM
       1793 C4' CYT
                        87
                                -0.575 -22.110
                                                14.093 12.01 0.04
ATOM
       1794 H4' CYT
                        87
                                -0.685 -21.577
                                                15.034 1.01 0.06
ATOM
       1795 04' CYT
                        87
                                -1.185 -21.350 13.068 16.00 -0.37
ATOM
       1796 C1' CYT
                        87
                                -2.572 -21.600 13.106 12.01 0.38
ATOM
       1797 H1' CYT
                        87
                                -3.009 -21.084 13.962 1.01 0.01
ATOM
       1798 N1
                 CYT
                        87
                                -3.220 -21.257
                                                11.811 14.01 -0.19
ATOM
       1799 C6
                 CYT
                        87
                                -2.602 -21.577 10.630 12.01 0.18
                 CYT
ATOM
       1800 H6
                        87
                                -1.661 -22.101
                                                10.660 1.01 0.10
                 CYT
ATOM
       1801
             C5
                        87
                                -3.157 -21.290
                                                 9.432 12.01 -0.58
       1802 H5
                 CYT
ATOM
                        87
                                -2.631 -21.559
                                                 8.529 1.01 0.15
ATOM
       1803 C4
                 CYT
                        87
                                -4.423 -20.620
                                                 9.447 12.01 0.93
ATOM
       1804
             N4
                 CYT
                        87
                                -5.004 -20.256
                                                 8.306 14.01 -0.83
ATOM
             H41 CYT
                        87
                                -4.542 -20.419
       1805
                                                 7.416 1.01 0.33
ATOM
       1806
             H42 CYT
                        87
                                -5.887 -19.763
                                                 8.332 1.01 0.35
ATOM
       1807
             N3
                 CYT
                        87
                                -5.036 -20.325
                                                10.602 14.01 -0.86
             C2 CYT
ATOM
       1808
                        87
                                -4.471 - 20.640
                                                11.802 12.01 0.86
ATOM
             02 CYT
                                -5.062 -20.366
       1809
                        87
                                                12.844 16.00 -0.51
ATOM
       1810 C3' CYT
                        87
                                -1.385 -23.407
                                                14.205 12.01 0.23
ATOM
       1811 H3' CYT
                        87
                                -0.839 - 24.254
                                                13.785 1.01 0.03
ATOM
       1812 C2' CYT
                        87
                                -2.612 -23.104
                                                13.344 12.01 -0.31
ATOM
       1813 H2' 1 CYT
                        87
                                -2.520 -23.661
                                                12.416 1.01 0.08
ATOM
       1814 H2' 2 CYT
                        87
                                -3.539 -23.359
                                                13.838 1.01 0.08
ATOM
       1815 03' CYT
                        87
                                -1.711 -23.629
                                                15.569 16.00 -0.51
ATOM
       1816 P
                 CYT
                        88
                                -2.561 -24.912 16.070 30.97 1.39
                                -2.355 -26.013 15.103 16.00 -0.85
ATOM
       1817 OP1 CYT
                        88
ATOM
       1818 OP2 CYT
                        88
                                -2.265 -25.125
                                               17.503 16.00 -0.85
       1819 05' CYT
ATOM
                        88
                                -4.092 -24.415
                                                15.941 16.00 -0.51
       1820 C5' CYT
ATOM
                        88
                                -4.604 -23.378
                                                16.759 12.01 0.12
ATOM
       1821 H5' 1 CYT
                        88
                                -4.668 -23.719 17.793 1.01 0.02
       1822 H5' 2 CYT
ATOM
                                -3.942 -22.512 16.711 1.01 0.02
                        88
       1823 C4' CYT
ATOM
                                -5.995 -22.948
                        88
                                                16.277 12.01 0.04
ATOM
       1824 H4' CYT
                        88
                                -6.333 -22.100 16.875 1.01 0.06
       1825 04' CYT
                                -5.938 -22.540 14.926 16.00 -0.37
ATOM
                        88
```

```
1001
                                                                1002
ATOM
       1826 C1' CYT
                        88
                                -7.180 -22.806 14.310 12.01 0.38
ATOM
       1827 H1' CYT
                        88
                                -7.905 -22.042 14.592 1.01 0.01
ATOM
       1828
            N1
                CYT
                        88
                                -6.977 -22.952 12.851 14.01 -0.19
ATOM
       1829
            60
                CYT
                        88
                                -5.940 -23.719 12.396 12.01 0.18
       1830 H6
                CYT
                                -5.315 -24.242 13.101 1.01 0.10
ATOM
                        88
                CYT
                                -5.689 -23.865
                                               11.082 12.01 -0.58
ATOM
       1831
            C5
                        88
       1832 H5
                CYT
ATOM
                        88
                                -4.863 -24.500
                                                10.824 1.01 0.15
       1833 C4
                CYT
                                -6.561 -23.175
                                                10.175 12.01 0.93
ATOM
                        88
       1834 N4 CYT
ATOM
                        88
                                -6.349 -23.220
                                                 8.859 14.01 -0.83
ATOM
       1835 H41 CYT
                                -5.549 -23.699
                                                 8.481 1.01 0.33
                        88
       1836 H42 CYT
                                -6.972 -22.702
                                                 8.251 1.01 0.35
ATOM
                        88
       1837 N3 CYT
                                -7.620 -22.489 10.623 14.01 -0.86
ATOM
                        88
ATOM
       1838 C2 CYT
                        88
                                -7.876 -22.379
                                                11.957 12.01 0.86
       1839 02 CYT
                                -8.888 -21.801
ATOM
                        88
                                               12.341 16.00 -0.51
       1840 C3' CYT
ATOM
                        88
                                -7.047 -24.068
                                               16.331 12.01 0.23
       1841 H3' CYT
ATOM
                        88
                                -6.576 -25.023
                                                16.563 1.01 0.03
       1842 C2' CYT
                                -7.557 -24.158 14.897 12.01 -0.31
ATOM
                        88
       1843 H2' 1 CYT
                                -7.028 -24.978 14.413 1.01 0.08
ATOM
                        88
       1844 H2' 2 CYT
                                -8.622 -24.338
                                               14.817 1.01 0.08
ATOM
                        88
       1845 03' CYT
                                -8.052 -23.696
                                               17.264 16.00 -0.51
ATOM
                        88
       1846 P
                                -9.351 -24.605 17.575 30.97 1.39
ATOM
                 CYT
                        89
       1847 OP1 CYT
                                -9.039 -26.007 17.217 16.00 -0.85
ATOM
                        89
ATOM
       1848 OP2 CYT
                                -9.819 -24.282 18.941 16.00 -0.85
                        89
ATOM
       1849 05' CYT
                        89
                               -10.445 -24.054 16.522 16.00 -0.51
       1850 C5' CYT
ATOM
                        89
                               -11.003 -22.756
                                                16.644 12.01 0.12
       1851 H5' 1 CYT
ATOM
                        89
                               -11.502 -22.653
                                                17.608 1.01 0.02
ATOM
       1852 H5' 2 CYT
                        89
                               -10.211 -22.009
                                                16.573 1.01 0.02
       1853 C4' CYT
ATOM
                        89
                               -12.027 -22.507
                                                15.529 12.01
       1854 H4' CYT
                               -12.423 -21.494 15.621 1.01
ATOM
                        89
             04' CYT
                               -11.403 -22.630 14.268 16.00 -0.37
ATOM
       1855
             C1' CYT
                               -12.297 -23.187 13.327 12.01
ATOM
       1856
                                                              0.38
                        89
             H1' CYT
                               -12.949 -22.413 12.921 1.01 0.01
ATOM
       1857
                 CYT
ATOM
       1858
             N1
                               -11.492 -23.908
                                                12.308 14.01 -0.19
                        89
             C6
                 CYT
                        89
                               -10.490 -24.744 12.723 12.01 0.18
ATOM
       1859
ATOM
       1860
             Н6
                 CYT
                        89
                               -10.400 -24.976
                                                13.772 1.01 0.10
ATOM
       1861
             С5
                 CYT
                        89
                                -9.614 -25.291
                                                11.856 12.01 -0.58
ATOM
       1862
             Н5
                 CYT
                        89
                                -8.845 -25.923
                                                12.268 1.01 0.15
ATOM
       1863
             C4
                 CYT
                        89
                                -9.780 -24.955
                                                10.471 12.01 0.93
             N4
                 CYT
                                -8.927 -25.425
                                                 9.559 14.01 -0.83
ATOM
        1864
                        89
ATOM
        1865
             H41 CYT
                        89
                                -8.167 -26.028
                                                 9.833 1.01
                                                             0.33
ATOM
        1866
             H42 CYT
                         89
                                -9.031 -25.136
                                                 8.594 1.01
                                                              0.35
             N3 CYT
ATOM
        1867
                         89
                                -10.801 -24.190
                                                10.058 14.01 -0.86
                                -11.693 -23.669
ATOM
        1868
             C2 CYT
                                                10.950 12.01 0.86
             02
                 CYT
                                -12.654 -23.020
                                                10.546 16.00 -0.51
 ATOM
        1869
                         89
             C3' CYT
                                                15.544 12.01 0.23
 ATOM
        1870
                         89
                                -13.183 -23.520
 ATOM
        1871
             H3' CYT
                         89
                                -13.001 -24.295
                                                16.288 1.01 0.03
        1872 C2' CYT
                         89
                                -13.117 -24.163
                                                14.162 12.01 -0.31
 ATOM
        1873 H2' 1 CYT
                                -12.623 -25.127
 ATOM
                         89
                                                14.266 1.01 0.08
 ATOM
        1874 H2' 2 CYT
                         89
                                -14.095 -24.305
                                                13.719 1.01 0.08
 ATOM
        1875 03' CYT
                         89
                                -14.402 -22.833 15.791 16.00 -0.51
```

```
1003
                                                                 1004
       1876 P
ATOM
                THY
                        90
                               -15.830 -23.586 15.925 30.97 1.39
ATOM
       1877 OP1 THY
                        90
                               -15.588 -24.978
                                               16.362 16.00 -0.85
ATOM
       1878 OP2 THY
                        90
                               -16.738 -22.717
                                               16.706 16.00 -0.85
             05' THY
ATOM
       1879
                        90
                               -16.362 -23.625 14.403 16.00 -0.51
ATOM
       1880 C5' THY
                        90
                               -16.704 -22.436 13.714 12.01 0.12
ATOM
       1881 H5' 1 THY
                               -17.607 -22.003 14.145 1.01 0.02
                        90
ATOM
       1882 H5' 2 THY
                               -15.890 -21.715 13.796 1.01 0.02
       1883 C4' THY
                               -16.933 -22.733 12.229 12.01 0.04
ATOM
                        90
ATOM
       1884 H4' THY
                               -17.118 -21.795
                                                11.702 1.01 0.06
                 THY
ATOM
       1885
             04'
                               -15.777 -23.336
                        90
                                                11.682 16.00 -0.37
ATOM
       1886
             C1'
                 THY
                               -16.160 -24.221
                                                10.655 12.01 0.38
                 THY
             H1'
ATOM
       1887
                        90
                               -16.439 -23.654
                                                 9.767 1.01 0.01
             N1
                 THY
ATOM
       1888
                        90
                               -15.055 -25.190 10.428 14.01 -0.22
                 THY
ATOM
       1889
             6
                               -14.557 -25.915
                        90
                                                11.483 12.01 0.03
ATOM
            Н6
                 THY
                               -15.024 -25.806
       1890
                                                12.449 1.01 0.13
ATOM
       1891
             C5
                 THY
                        90
                               -13.471 -26.711 11.343 12.01 -0.18
ATOM
       1892
             C7 THY
                        90
                               -13.036 -27.494 12.568 12.01 -0.38
             H71 THY
ATOM
       1893
                               -13.132 -28.559
                                                12.357 1.01
                        90
                                                              0.11
ATOM
       1894
             H72 THY
                        90
                               -11.993 -27.269
                                                12.790 1.01
                                                              0.11
ATOM
             H73 THY
                               -13.646 -27.255 13.441 1.01
                                                              0.11
       1895
                        90
ATOM
       1896
             C4 THY
                        90
                               -12.771 -26.811 10.082 12.01 0.81
ATOM
       1897
             04
                 THY
                               -11.750 -27.465
                        90
                                                 9.890 16.00 -0.46
ATOM
       1898
             N3
                 THY
                        90
                               -13.343 -26.072
                                                 9.057 14.01 -0.85
                 THY
ATOM
       1899
             Н3
                        90
                               -12.917 -26.108
                                                 8.139 1.01 0.35
             C2
ATOM
       1900
                 THY
                        90
                               -14.485 -25.291
                                                 9.159 12.01 0.85
             02
                THY
ATOM
       1901
                        90
                               -14.955 -24.748
                                                 8.163 16.00 -0.49
ATOM
       1902
             C3' THY
                        90
                               -18.089 -23.712
                                                11.964 12.01 0.23
ATOM
       1903
            H3' THY
                        90
                               -18.523 -24.058
                                                12.903 1.01 0.03
ATOM
       1904 C2' THY
                        90
                               -17.403 - 24.881
                                                11.251 12.01 -0.31
ATOM
       1905 H2' 1 THY
                               -17.156 -25.627
                        90
                                                12.004 1.01 0.08
ATOM
       1906 H2' 2 THY
                        90
                               -18.013 -25.346
                                                10.480 1.01 0.08
ATOM
       1907 03' THY
                               -19.062 -23.061 11.163 16.00 -0.51
ATOM
            P
                 ADE
                               -20.489 -23.731
       1908
                        91
                                                10.809 30.97 1.39
       1909 OP1 ADE
                                -20.855 -24.666
ATOM
                                                11.896 16.00 -0.85
       1910 OP2 ADE
ATOM
                               -21.422 -22.649
                        91
                                                 10.424 16.00 -0.85
ATOM
       1911 05' ADE
                         91
                               -20.155 -24.596
                                                 9.493 16.00 -0.51
ATOM
       1912 C5' ADE
                                -19.941 -23.972
                         91
                                                  8.243 12.01 0.12
ATOM
       1913 H5' 1 ADE
                         91
                                -20.884 -23.570
                                                 7.869 1.01 0.02
ATOM
       1914 H5' 2 ADE
                                -19.225 -23.156
                         91
                                                  8.351 1.01
                                                              0.02
ATOM
       1915 C4'
                 ADE
                        91
                                -19.383 -24.975
                                                 7.231 12.01 0.04
ATOM
       1916 H4'
                 ADE
                                -19.245 -24.469
                                                  6.274 1.01 0.06
                         91
ATOM
       1917
             04' ADE
                        91
                                -18.128 -25.476
                                                  7.638 16.00 -0.37
ATOM
       1918
             C1'ADE
                         91
                               -17.884 - 26.624
                                                  6.860 12.01 0.38
ATOM
       1919
             H1'
                 ADE
                         91
                               -17.678 - 26.355
                                                  5.823 1.01 0.01
             N9
ATOM
       1920
                 ADE
                         91
                                -16.796 -27.421
                                                  7.454 14.01 -0.07
       1921
             68
                 ADE
ATOM
                        91
                                -16.642 -27.784
                                                  8.766 12.01 0.26
       1922
             Н8
                 ADE
                                -17.387 -27.533
ATOM
                                                  9.509 1.01 0.06
ATOM
       1923
             N7
                 ADE
                                -15.533 - 28.427
                         91
                                                  9.016 14.01 -0.54
ATOM
       1924
             C5
                 ADE
                         91
                                -14.923 -28.516
                                                  7.767 12.01 -0.10
ATOM
       1925 C6
                ADE
                         91
                                -13.704 -29.067
                                                  7.324 12.01 0.77
```

			(504)		特開200
	1005				1006
ATOM	1926 N6 ADE	91	-12.820 -29.631	8.152 14.01	-0.77
ATOM	1927 H61 ADE	91	-11.942 -29.998	7.807 1.01	0.32
ATOM	1928 H62 ADE	91	-13.014 -29.642	9.142 1.01	0.34
ATOM	1929 N1 ADE	91	-13.421 -29.031	6.008 14.01	-0.77
ATOM	1930 C2 ADE	91	-14.291 -28.467	5.174 12.01	0.66
ATOM	1931 H2 ADE	91	-14.018 -28.463	4.130 1.01	-0.03
ATOM	1932 N3 ADE	91	-15.445 -27.879	5.468 14.01	-0.73
ATOM	1933 C4 ADE	91	-15.706 -27.936	6.801 12.01	0.55
ATOM	1934 C3' ADE	91	-20.249 -26.229	7.029 12.01	0.23
ATOM	1935 H3' ADE	91	-20.885 -26.410	7.896 1.01	0.03
ATOM	1936 C2' ADE	91	-19.214 -27.358	6.962 12.01	-0.31
ATOM	1937 H2' 1 ADE	91	-19.263 -27.930	7.890 1.01	
ATOM	1938 H2' 2 ADE	91	-19.343 -28.022	6.114 1.01	0.08
ATOM	1939 03' ADE	91	-21.012 -26.056	5.845 16.00	
ATOM	1940 P ADE	92	-21.970 -27.203	5.230 30.97	
ATOM	1941 OP1 ADE	92	-22.397 -28.103	6.324 16.00	
ATOM	1942 OP2 ADE	92	-22.984 -26.546	4.376 16.00	
ATOM	1943 05' ADE	92	-20.960 -28.015	4.270 16.00	
ATOM	1944 C5' ADE	92	-20.332 -27.382	3.171 12.01	
ATOM	1945 H5' 1 ADE	92	-21.080 -27.121	2.421 1.01	
ATOM	1946 H5' 2 ADE	92	-19.830 -26.472	3.503 1.01	
ATOM	1947 C4' ADE	92	-19.284 -28.305	2.543 12.01	
ATOM	1948 H4' ADE	92	-18.804 -27.776	1.718 1.01	
ATOM	1949 04' ADE	92	-18.296 -28.651	3.502 16.00	
ATOM	1950 C1' ADE	92	-17.923 -29.997	3.306 12.01	
ATOM	1951 H1' ADE	92	-17.264 -30.084		0.01
ATOM	1952 N9 ADE	92	-17.296 -30.543	4.529 14.01	
ATOM	1953 C8 ADE	92	-17.803 -30.565	5.804 12.01	
ATOM	1954 H8 ADE	92	-18.786 -30.195	6.049 1.01	
ATOM	1955 N7 ADE	92	-17.001 -31.073	6.697 14.01	
ATOM	1956 C5 ADE	92	-15.880 -31.424	5.956 12.01	
ATOM	1957 C6 ADE	92	-14.657 -32.024	6.308 12.01	
ATOM	1958 N6 ADE	92	-14.379 -32.361		
ATOM	1959 H61 ADE	92	-13.493 -32.793	7.796 1.01	
ATOM	1960 H62 ADE	92	-15.061 -32.176	8.287 1.01	
ATOM	1961 N1 ADE	92	-13.747 -32.260		
ATOM	1962 C2 ADE	92	-14.041 -31.911		
ATOM	1963 H2 ADE	92	-13.301 -32.168	3.351 1.01	
ATOM	1964 N3 ADE	92	-15.153 -31.344	3.632 14.01	
ATOM	1965 C4 ADE	92	-16.049 -31.116	4.631 12.01	
ATOM	1966 C3' ADE	92	-19.872 -29.632	2.037 12.01	
ATOM	1967 H3' ADE	92	-20.963 -29.626	2.078 1.01	
ATOM	1968 C2' ADE	92	-19.282 -30.635	3.029 12.01	
ATOM	1969 H2' 1 ADE		-19.897 -30.637		
ATOM	1909 H2 1 ADE		-19.203 -31.647		
ATOM	1970 112 2 ADE	92	-19.431 -29.843	0.706 16.00	
ATOM	1971 03 ADE		-19.956 -31.073	-0.198 30.97	
ATOM	1972 1 CTT		-21.050 -31.764	0.519 16.00	
ATOM	1974 OP2 CYT		-20.173 -30.580	-1.576 16.00	
ATOM	1974 OF CTT		-18.679 -32.049	-0.208 16.00	
ATUM	1919 09 011	93	-10.019 -32.049	-0.200 10.UU	0.31

```
1007
                                                                1008
ATOM
      1976 C5' CYT
                        93
                              -17.526 -31.742 -0.971 12.01 0.12
      1977 H5' 1 CYT
                        93
                              -17.770 -31.737
                                               -2.034 1.01 0.02
ATOM
ATOM
      1978 H5' 2 CYT
                        93
                              -17.144 -30.761
                                               -0.685 1.01 0.02
      1979 C4' CYT
                        93
                              -16.447 -32.793
                                               -0.704 12.01 0.04
ATOM
       1980 H4' CYT
                        93
                              -15.531 -32.540
                                                -1.241 1.01 0.06
ATOM
      1981 04' CYT
                        93
                               -16.177 -32.824
                                                0.678 16.00 -0.37
ATOM
      1982 C1' CYT
                        93
                               -15.733 -34.111
                                                 1.037 12.01 0.38
ATOM
      1983 H1' CYT
ATOM
                        93
                               -14.683 -34.208
                                                0.757 1.01 0.01
ATOM
       1984 N1
                CYT
                        93
                               -16.003 -34.322
                                                 2.480 14.01 -0.19
                 CYT
ATOM
       1985
             С6
                        93
                               -17.199 -33.919
                                                 3.020 12.01 0.18
ATOM
       1986
            Н6
                 CYT
                        93
                               -17.950 -33.486
                                                 2.377 1.01 0.10
             C5
                 CYT
ATOM
       1987
                        93
                               -17.466 -34.052
                                                 4.337 12.01 -0.58
            Н5
                 CYT
                        93
                               -18.421 -33.701
ATOM
       1988
                                                 4.696 1.01 0.15
ATOM
                 CYT
                        93
                               -16.432 -34.630
                                                 5.150 12.01 0.93
       1989
             C4
       1990 N4
                 CYT
                        93
                               -16.568 -34.704
ATOM
                                                 6.475 14.01 -0.83
       1991 H41 CYT
                        93
                               -17.403 -34.361
ATOM
                                                 6.924 1.01 0.33
ATOM
       1992 H42 CYT
                        93
                               -15.779 -35.023
                                                 7.025 1.01 0.35
ATOM
       1993
             N3
                 CYT
                        93
                               -15.278 -35.047
                                                 4.614 14.01 -0.86
ATOM
       1994
             C2 CYT
                        93
                               -15.032 -34.917
                                                 3.280 12.01 0.86
             02
                 CYT
ATOM
       1995
                        93
                               -13.969 -35.317
                                                 2.813 16.00 -0.51
ATOM
       1996 C3' CYT
                        93
                               -16.896 -34.217 -1.062 12.01 0.23
             H3' CYT
ATOM
       1997
                               -17.966 -34.261
                        93
                                                -1.264 1.01 0.03
ATOM
       1998 C2' CYT
                        93
                               -16.598 -35.043
                                                 0.187 12.01 -0.31
ATOM
       1999 H2' 1 CYT
                        93
                               -17.542 -35.266
                                                 0.685 1.01 0.08
ATOM
       2000 H2' 2 CYT
                        93
                               -16.073 -35.972 -0.037 1.01 0.08
ATOM
       2001 03' CYT
                        93
                               -16.162 -34.710 -2.164 1.01 -0.51
       2002 H03' CYT
ATOM
                        93
                               -16.489 -35.586 -2.379 1.01 0.31
TER
END
```

## 【0069】引用文献

Archer, S. J., Ikura, M., Torchia, D. A., and Bax, A., (1991). An alternative 3D NMR technique for correlating backbone 15N with side chain H( resonances in larger proteins. J. Magn. Reson. 95, 636-641.

Bianchi, A., Smith, S., Chong, L., Elias, P., and de Lange, T. (1997). TRF1 is a dimmer and bends te lomeric DNA. EMBO J. 16, 1785-1794.

Bianchi, A., Stansel, R. M., Fairall, L., Griffit h, J. D., Rhodes, D., and de Lange, T. (1999). TRF l binds a bipartite telomeric site with extreme spatial flexibility. EMBO J. 18, 5735-5744.

Bilaud, T., Brun, C., Ancelin, K., Koering, C. E., Laroche, T., and Gilson, E. (1997). Telomeric loc alization of TRF2, a novel human telobox protein. Nature Genet. 17, 236-239.

Billeter, M., Qian, Y., Q., Otting, G., M·ler, M., Gehring, W. and W·hrich, K. (1993). Determina tion of the NMR solution structure of an Antennape dia homeodomain-DNA complex. J. Mol. Biol. 234, 10 50

## 30 84-1093.

Blackburn, E.H. (1992). Structure and function of telomeres. Nature 350,569-573.

Blackburn, E.H. (1994). Telomeres: No end in sight. Cell 77, 621-623.

Broccoli, D., Smogorzewska, A., Chong, L., and de Lange, T. (1997). Human telomeres contain two dist inct Myb-related proteins. TRF1 and TRF2. Nature Genet. 17, 231-235.

Brun, C., Marcand, S., and Gilson, E. (1997). Prot eins that bind to double-stranded regions of telom eric DNA. Trends Cell Biol. 7, 317-324.

Chong, L., van Steensel, B., Broccoli, D., Erdjume nt-Bromage, H., Hanish, J., Tempst, P., and de Lange, T. (1995). A human telomeric protein. Science 270, 1663-1667.

Cooper, J. P., Nimmo, E. R., Allshire, R. C., and Cech, T. R. (1997). Regulation of telomere length and function by a Myb-domain protein in fission ye ast. Nature 385, 744-747.

60 Delaglio, F., Grzesiek, S., Vuister, G. W., Zhu,

G., Pfeifer, J., and Bax, A. (1995). NMRPipe: A multidimensional spectral processing system based on UNIX PIPES. J. Biomol. NMR 6, 277-293.

Foster, M.P., Wuttke, D.S., Radhakrishnan, I., Cas e, D.A., Gottesfeld, J.M. and Wright, P.E. (1997). Domain packing and dynamics in the DNA complex of the N-terminal zinc fingers of TFIIIA. Nat. Struc t. Biol. 4, 605-608.

Fraenkel, E. and Pabo, C.O. (1998). Comparison of X-ray and NMR structures for the Antennapedia home odomain-DNA complex. Nature Struct. Biol. 5,692-69

Garret, D.S., Powers, R., Gronenborn, A.M. and Clore, G.M. (1991). A common sense approach to peak picking in two-, three-, and four-dimensional spectra using automatic computer analysis of contour diagrams. J. Magn.Reson. 99, 214-220.

Gehring, W.J., Qian, Y.Q., Billeter, M., Furukubo-Tokunaga, K., Schier, A.F., Resendez-Perez, D., Aff olter, M., Otting, G. and W殳hrich, K. (1994). Hom 20 eodomain-DNA recognition. Cell 78, 211-223.

Gerchman, S.E., Graziano, V. and Ramakrishnan, V. (1994). Protein Expression Purificat. 5, 242-251. Griffith, J., Bianchi, A., and de Lange, T. (1997). TRF1 promotes parallel pairing of telomeric tracts in vitro. J. Mol. Biol. 278, 79-88.

Grzesiek, S. and Bax, A., (1992a). Improved three-dimensional triple resonance NMR techniques applie d to a 31 kDa protein. J. Mag. Res. 96, 432-440. Grzesiek, S., and Bax, A., (1992b). Correlating ba 30 kDays and additable approach in large and additable approach in large and additable approach.

ckbone amide and sidechain resonances in larger proteins by multiple relayed triple resonanceNMR. J. Am. Chem. Soc. 114, 6291-6293.

Grzesiek, S., Anglister, J., and Bax, A., (1993). Correlation of backbone amide and aliphatic side-c hain resonances in 13C/15N-enriched proteinsby iso tropic mixing of 13C magnetization. J. Magn. Reso n. B 101, 114-119.

Henry, Y.A.L., Chambers, A., Tsang, J.S.H., Kingsm an, A.J. and Kingsman, S.M. (1990). Charaterisation 40 of the DNA binding domain of the yest RAP1protei n. Nucleic Acids Res. 18, 2617-2623.

Kay, L. E., Xu, G. -Y., Singer, A. U., Muhandiram, D. R., and Forman-Kay, J. D. (1993). A gradient-e nhanced HCCH-TOCSY experiment for recordingside-ch ain 1H and 13C correlations in H2O samples of prot ein. J. Magn. Reson. (B) 101, 333-337.

Kissinger, C.R., Liu, B., Martin-Blanco, E., Kornb erg, T.B. and Pabo, C.O. (1990). Crystal structure of an engrailed homeodomain-DNA complex at 2.8 ang 50

strom resolution: a framework for understanding ho meodomain-DNA interactions. Cell 63, 579-590. Klein, F., Laroche, T., Cardenas, M.E., Hofmann,

J.F.-X., Schweizer, D.and Gasser, S.M. (1992). Loc alization of RAP1 and topoisomerase II in nuclei a nd meiotic chromosomes of yeast. J. Cell. Biol. 17 7, 935-948.

Klemm, J.D., Rould, M.A., Aurora, W.H. and Pabo, C.O. (1994). Crystal structure of the Oct-1 POU do main bound to an Octamer site: DNA recognition with tethered DNA-binding modules. Cell 77, 21-32. Konig, P., Giraldo, G., Chapman, L., and Rhodes, D. (1996). The crystalstructure of the DNA-binding domain of yeast RAP1 in complex with telomeric DN A. Cell 85, 125-136.

Konig, P and Rhodes, D. (1997). Recognition of tel omeric DNA. TIBS 22, 43-47.

Konig, P., Fairall, L. and Rhodes, D. (1998). Sequence-specific DNA recognition by the Myb-like doma in of the human telomere binding protein TRF1: a model for protein-DNA complex. Nucl. Acids Res, 26, 1731-1740.

Koradi, R., Billeter, M., and Wuhrich, K. (1996). MOLMOL: a program fordisplay and analysis of macro molecular structures. J. Mol. Graph. 14, 52-55. Krauskopf, A. and Blackburn, E.H. (1996). Control of thelomeric growth by interactions of RAP1 with the most distal telomeric repeats. Nature 383, 354-357.

D Laskowski, R.A., Rullmann, J.A.C., MacArthur, M. W., Kaptein, R. and Thornton, J.M. (1996). AQUA and PROCHECK-NMR: programs for checking the quality of protein structures solved by NMR. J. Biomol. NMR 8, 477-486.

Lipsick, J. S. (1996). One billion years of Myb. 0 ncogene 13, 223-235.

Martin, C., and Paz-Ares, J. (1997). MYB transcription factors in plants. Trends Genet. 13, 67-73.

Mucenski, M.L., McLain, K., Kier, A.B., Swerdlow, S.H., Schereiner, C.M., Miller, T.A., Pietryga, D.

W., Scott, W.J. and Potter, S.S. (1991). A functio nal c-myb gene is required for normal murine fetal hepatic hematopoiesis. Cell 65, 677-689.

Nakai, T., Kidera, A., and Nakamura, H. (1993). In trinsic nature of thethree-dimensional structure of f proteins as determined by distance geometry with good sampling properties. J. Biomol. NMR 3, 19-4 O.

Nicholls, A., Sharp, K. A. and Honig, B. (1991). Protein folding and association: insights from the

interafcial and thermodynamic properties of hydroca robons. Proteins 11, 281-296.

Nishikawa, T., Nagadoi, A., Yoshimura, S., Aimoto, S. and Nishimura, Y.(1998). Solution structure of the DNA-binding domain of human telomeric protein, hTRF1. Structure 6, 1057-1065.

Ogata, K., Hojo, H., Aimoto, S., Nakai, T., Nakamu ra, H., Sarai, A., Ishii, S. and Nishimura, Y. (19 92). Solution structure of a DNA-binding unit of M yb: a helix-turn-helix-related motif with conserve 10 d tryptophans forming a hydrophobic core. Proc. Na tl. Acad. Sci. USA. 89, 6428-6432.

Ogata, K., Morikawa, S., Nakamura, H., Sekikawa, A., Inoue, Ţ., Kanai, H., Sarai, A., Ishii, S. and Nishimura, Y. (1994). Solution structure of specific DNA complex of the Myb DNA-binding domain with cooperative recognition helices. Cell 79, 639-64

Ogata, K., Morikawa, S., Nakamura, H., Hojo, H., Yoshimura, S., Zhang, R., Aimoto, S., Ametani, Y., Hirata, Z., Sarai, A., Ishii, S. and Nishimura, Y. (1995). Comparison of the free and DNA-complexed forms of the DNA-binding domain from c-Myb. Nature Struct. Biol. 2, 309-320.

Ogura, K., Terasawa, H., and Inagaki, F. (1996). A n improved double-tuned and isotope-filtered pulse scheme based on a pulsed field gradient anda wide -band inversion shaped pulse. J. Biomol. NMR 8, 49 2-498.

Passner, J.M., Ryoo, H.D., Shen, L., Mann, R.S. an 30 d Aggarwal, A.K. (1999). Structure of a DNA-bound Ultrabithorax-Extradenticle homeodomain complex. N ature 397, 714-719.

Qian, Y.Q., Billeter, M., Otting, G., M·ler, M., Gehring, W., and W·hrich, K. (1989). The structur e of the Antennapedia homeodomain determinedby NMR spectroscopy in solution: comparison with prokary otic repressors. Cell 59, 573-580.

Saenger, W. (1984). Principles of nucleic acid structure (New York: Springer Verlag).

Shore, D., and Nasmyth, K. (1987). Purification and cloning of a DNA binding protein from yeast that binds to both silencer and activator elements. Ce 11 51, 721-732.

Smogorzewska, A., van Steensel, B., Bianchi, A., O\*

\*elmann, S., Schaefer, M. R., Schnapp, G., and de Lang, T. (2000). Control of human telomere length by TRF1 and TRF2. Mol Cell. Biol. 20, 1659-1668.

1012

Tanikawa, J., Yasukawa, T., Enari, M., Ogata, K., Nishimura, Y., Ishii, S., and Sarai, A. (1993). Rec ognition of specific DNA sequences by the c-myb pr oto-oncogene product: role of three repeat units in the DNA-binding domain. Proc. Natl. Acad. Sci. USA 90, 9320-9324.

Taylor, H.O.B., O' Reilly, M., Leslie, A.G.W., and Rhodes, D. (2000). How the multifunctional yeast Raplp discriminates between DNA target sites: A cr ystallographic Analysis. J. Mol. Biol. 303, 693-70 7.

van Steensel, B., and de Lang, T. (1997). Control of telomere length bythe human telomeric protein T RF1. Nature 385, 740-743.

Vuister, G. W. and Bax, A., (1993). Quantitative J correlation: a new approach for measuring homonuc lear three bond J-(HN-H() coupling constants in 15N -enriched protein. J. Am. Chem. Soc., 115, 7772-77 77.

Wilson, D.S., Guenther, B., Desplan, C. and Kuriya n, J. (1995). High resolution crystal structure of a Paired (PAX) class cooperative homeodomain dimm er on DNA. Cell 82, 709-719.

Wolberger, C., Vershon, A.K., Liu, B., Johnson, A. D. and Pabo, C.O. (1991). Crystal structure of a M AT(2 homeodomain-operator complex suggests agenera 1 model for homeodomain-DNA interactions. Cell 67, 517-528.

Yu, E.Y., Kim, S.E., Kim, J.H., Ko, J.H., Cho, M. H. and Chung, I.K. (2000). Sequence-specific DNA r ecognition by the Myb-like domain of plant telomer ic protein RTBP1. J.Biol.Chem. 275, 24208-24214. Zakian, V. A. (1995). Telomeres: beginning to unde rstand the end. Science 270, 1601-1607.

[0070]

【発明の効果】本発明により、テロメアDNAに結合したヒトTRF1のDNA結合ドメインの立体構造が明らかになった。これにより、テロメアDNAに結合して生理活性を奏する薬物などの有用な物質を得ることができるようになった。

[0071]

【配列表】

SEQUENCE LISTING

<110> Nishimura, Yoshifumi
<120> Use of steric structure of telomeric DNA complex of
human TRF1

<211> 13 <212> DNA 1014

```
<130> P01-051
<140>
<141>
<160> 20
<170> PatentIn Ver. 2.1
<210> 1
<211> 12
<212> DNA
<213> Artificial Sequence
<220>
<223> Description of Artificial Sequence: synthetic DNA
<400> 1
gttagggtta gg
                                                                    12
<210> 2
<211> 13
<212> DNA
<213> Artificial Sequence
<220>
<223> Description of Artificial Sequence: synthetic DNA
<400> 2
                                                                    13
gttagggtta ggg
<210> 3
<211> 13
<212> DNA
<213> Artificial Sequence
<220>
\langle 223 \rangle Description of Artificial Sequence: synthetic DNA
<400> 3
                                                                    13
gtaagggtta ggg
<210> 4
<211> 13
<212> DNA
<213> Artificial Sequence
<220>
<223> Description of Artificial Sequence: synthetic DNA
<400> 4
                                                                     13
gttagggtaa ggg
<210> 5
```

. 1015	(509)	特開2003-135087
1015 <213> Artificial Sequence		1016
(220)		
<pre>&lt;223&gt; Description of Artificia</pre>	l Sequence: synthetic DNA	
<400> 5	oj	
gttagggttt ggg		13
<210> 6		
(211) 13		•
<212> DNA		

	(510)	特開2003-135087
	1017	1018
(212> )		
	Artificial Sequence	
(220>		
	Description of Artificial Sequence: synthetic DNA	
(400>		
gttagg	gtga ggg	13
(210>	11	
(211)		
(212)		
	Artificial Sequence	
(220)		
<223>	Description of Artificial Sequence: synthetic DNA	
<400>	11	
gttagg	gtca ggg	13
/010\	10	
〈210〉		
<211> <212>		
	Artificial Sequence	
<220>	m en retair ocquence	
	Description of Artificial Sequence: synthetic DNA	
<400>		
gtaagg	ggtaa ggg	13
<210>	12	
<210>		
<212>		
	Artificial Sequence	
<220>	•	
<223>	Description of Artificial Sequence: synthetic DNA	
<400>	13	
gtttgg	ggtta ggg	13
<210>	14	
<211>		
<212>		
	Artificial Sequence	
<220>	Description of Antificial Comments and the DNA	
<b>\</b> 223>	Description of Artificial Sequence: synthetic DNA	
<400>	14	
	ggtta ggg	13

(511)	特開2003-135087
1019	1020
⟨211⟩ 13	
<212> DNA	
<213> Artificial Sequence	
<220>	
<223> Description of Artificial Sequence: synthetic D	ONA .
<400> 15	
gttagcgtta ggg	13
<210> 16	
<211> 13 ·	
<212> DNA	
<213> Artificial Sequence	
<220>	
$\langle 223 \rangle$ Description of Artificial Sequence: synthetic D	DNA
<400> 16	
gttaggctta ggg	13
<210> 17	
⟨211⟩ 13	
<212> DNA	
<213> Artificial Sequence	
⟨220⟩	
<pre>&lt;223&gt; Description of Artificial Sequence: synthetic I</pre>	DNA
<400> 17	
gtttgggttt ggg	13
<210≻ 18	
⟨211⟩ 13	
<212> DNA	
<213> Artificial Sequence	
⟨220⟩	
<pre>&lt;223&gt; Description of Artificial Sequence: synthetic I</pre>	DNA
<400> 18	
gttcgggttc ggg	13
<210> 19	
⟨211⟩ 13	
<212> DNA	
<213> Artificial Sequence	
⟨220⟩	
$\langle 223 \rangle$ Description of Artificial Sequence: synthetic	DNA
<400> 19	
gttggggttg ggg	13

1022

1021

⟨211⟩ 13

<212> DNA

<213> Artificial Sequence

<220>

<223> Description of Artificial Sequence: synthetic DNA

<400> 20

actgtcataa atc

13

## [0072]

【配列表フリーテキスト】

【配列番号1】配列番号1は、テロメアDNA中に存在 10 するヌクレオチド配列を示す。

【配列番号2】配列番号2は、野生型13mer DNAのヌク レオチド配列を示す。

【配列番号3】配列番号3は、DNA変異体T3Aのヌクレオ チド配列を示す。

【配列番号4】配列番号4は、DNA変異体T9Aのヌクレオ チド配列を示す。

【配列番号5】配列番号5は、DNA変異体A10Tのヌクレ オチド配列を示す。

【配列番号6】配列番号6は、DNA変異体A4Gのヌクレオ 20 チド配列を示す。

【配列番号7】配列番号7は、DNA変異体T8Aのヌクレオ チド配列を示す。

【配列番号8】配列番号8は、DNA変異体T8Gのヌクレオ チド配列を示す。

【配列番号9】配列番号9は、DNA変異体T8Cのヌクレオ チド配列を示す。

【配列番号10】配列番号10は、DNA変異体T9Gのヌク レオチド配列を示す。

レオチド配列を示す。

【配列番号12】配列番号12は、DNA変異体T3AT9Aの ヌクレオチド配列を示す。

【配列番号13】配列番号13は、DNA変異体A4Tのヌク レオチド配列を示す。

【配列番号14】配列番号14は、DNA変異体G5Cのヌク レオチド配列を示す。

【配列番号15】配列番号15は、DNA変異体G6Cのヌク レオチド配列を示す。

【配列番号16】配列番号16は、DNA変異体G7Cのヌク 40 レオチド配列を示す。

【配列番号17】配列番号17は、DNA変異体A4TA10Tの ヌクレオチド配列を示す。

【配列番号18】配列番号18は、DNA変異体A4CA10Cの ヌクレオチド配列を示す。

【配列番号19】配列番号19は、DNA変異体A4GA10Gの ヌクレオチド配列を示す。

【配列番号20】配列番号20は、非特異的13mer DNA のヌクレオチド配列を示す。

【図面の簡単な説明】

【図1】(a)ヒトTRF1、マウスTRF1、ヒトTRF2、マウスT RF2、RTBP1、Taz1p及びRap1pの2つのサブドメインのDN A結合ドメイン、及びc-Myb DNA結合ドメインの3つのリ ピートの配列を並べたもの。疎水的コアに含まれてい て、非常によく保存されたアミノ酸は陰影をつけたボッ クスで囲まれている。3つの典型的な保存されたトリプ トファンは陰影をつけたボックス中のWで示されていて (完全に同一ではないけれども、似ているのは、陰影を つけたボックス中のフェニルアラニン(F)及びチロシ ン(Y)である)、2つの極性残基(それは、分子内で 塩橋を作っている) は配列の上の線で結ばれているが、 それは陰影をつけたボックス中のグルタミン酸(E(白 抜き以外のもの)及びアルギニン(R))である(完全 に同一ではないけれども、似ているのは、陰影をつけた ボックス中のグルタミン酸(E(白抜きのもの))およ びリシン(K)である)。3つのヘリックスの領域はア ンダーラインで示している。DNA塩基と相互作用するア ミノ酸は黒丸で示してあって、糖リン酸骨格と相互作用 するアミノ酸は白三角で示してあって、両方と相互作用 するアミノ酸は黒三角で示してある。(b)DNA二重鎖 の配列。ここで使用した番号付けを示している。(c) <sup>13</sup> Cと<sup>15</sup> Nで二重に標識したDNA結合ドメインと非標識DNA 【配列番号11】配列番号11は、DNA変異体T9Cのヌク 30 との複合体中の3次元<sup>13</sup> C編集(F1)、<sup>13</sup> Cフィルター (F3) HSQC-NOESYスペクトル。

> 【図2】ヒトTRF1のDNA結合ドメインの構造。(a)2 0個のDNA結合ドメインが13merのDNAに結合したNMRの構 造を重ね描きで示したもの。DNA結合ドメインの骨格原 子(N, C。, C')、アミノ酸Arg378番~Ser435番はグ レーで示されていて、DNAのすべての重原子は黒で示さ れている。(b) DNAに結合した状態の20個のNMR構造 のタンパク質部分の重ね描きを前と後ろから見た図。

(c) DNAフリーのときの25個のNMR構造の重ね描きで 前と後ろから見た図。(d) DNAフリーのとき(白丸)及 びDNAに結合したとき(黒四角)の異核種NOEの値が示さ れている。3つのヘリックスの領域は円筒上で下の方に 示されている。この図はプログラムSYBYL(Tripos Inc., St. Louis, MO)を使って描いた。

【図3】TRF1 DNA結合ドメインのDNA認識を示してい る。(a) DNA複合体中で観測された分子間の接触のま とめ。黒い矢印は親水的な相互作用を示し、破線の矢印 は疎水的な相互作用を示している。DNAと相互作用する アミノ酸は、20個のNMR構造の中で、70%以上接触 50 している場合を黒で、30~70%で接触している場合

1024

をグレーで描いてある。両者の色が混じっているところ は、両方の相互作用が見えていることを意味する。

(b) DNAの小さな溝での相互作用を示している。Arg38 0番の側鎖、タンパク質の骨格の一部、及びDNA構造の平均が示されている。左はタンパク質部分の構造の集合体で、右はタンパク質部分の平均構造を示している。タンパク質の骨格及びDNA及び塩基を示したが、分子間相互作用に係わるアミノ酸を除いてある。(c) DNAの大きな溝におけるLys 421番の相互作用を示している。この図はプログラムSYBYL(Tripos Inc., St. Louis, MO)を用いて作られている。

【図4】DNA結合ドメインと19種類の13mer DNA分子と の滴定実験。低磁場側のプロトンのスペクトルには、DN A中の塩基対を形成しているイミノプロトン、さらに、T rp 403番のイミノプロトンの低磁場シフトしたものが示 されている((a)-(d))。タンパク質とDNAのモ ル比は、各々のスペクトルの上に示してある。(a)野 生型13mer DNA (w t) (その配列は図1 (b) に示し てある)の滴定実験。(b)10番目の位置をAからTに 置換したDNA変異体(A10T)に対する滴定実験。(c) 4番目の位置をAからTに置換したDNA変異体(A4T)に対 する滴定実験。(d)・非特異的13mer DNA二重鎖(n s)の滴定実験。(e) 19種類のDNA分子の結合親和 性の要約。グループ1の野生型は、図5(a)に示すよ うに最も強いDNA結合活性を持っていて、グループ2の 3つの変異体は、図5(b)に示すようにかなり特異的 な結合活性をまだ保持していて、グループ3のすべての 変異体は、図5(c)に示すように特異的なDNA結合活 性をなくしていて、グループ4の非特異的DNAは図5

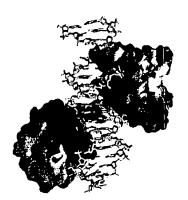
(d) に示すように結合活性をなくしている。ここで使\*30

\*用したDNAの配列は以下の通りである。wt: GTTACCGTTAC GG (配列番号2), T3A: GTAAGGGTTAGGG (配列番号3), T9A:GTTAGGGTAAGGG (配列番号4), A10T: GTTAG GCTTTCGG (配列番号5), A4G: GTTCCGCTTACGG (配列番号6), T8A: GTTAGGGATAGGG (配列番号7), T8C: GTT AGGCGTAGGG (配列番号8), T8C: GTTAGGGCTAGGG (配列番号9), T9G: GTTAGGGTGAGGG (配列番号10), T9C: GTTAGGGTCAGGG (配列番号11), T3AT9A: GTAAGGGTAA GGG (配列番号12), A4T: GTTTGGGTTAGGG (配列番号13), G5C: GTTACGGTTAGGG (配列番号14), G6C: GTTAGCGTTAGGG (配列番号15), G7C: GTTAGGCTTAGGG (配列番号17), A4CA1OC:GTTCGGGTTCGGG (配列番号18), A4GA1OG: GTTCGGGTTCGGG (配列番号19), ns13: ACTGTCA TAAATC (配列番号20).

【図5】グレーで示したTRF1のDNA結合ドメインのDNAに対するDNA結合の配向の構造比較で、(a) c-MybのR2は黒で、(b) Rap1pのD1は黒で、(c) エングレイルドホメオドメインは黒で示した。各々の図で、各々のタンパク質で覆われているDNAの部分のリン酸原子が重ね描きで示してある。この図はプログラムMOLMOL(Koradi et al., 1996)を使って作った。

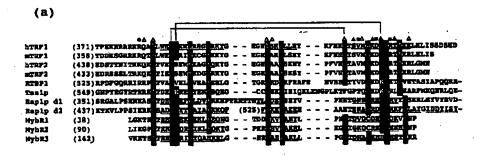
【図6】TRF1の2つのDNA結合ドメインがテロメアDNA (右)に結合しているモデル構造及びそのときのタンパク質部分の静電的なポテンシャル表面(左)。2つのDN A結合ドメインは各々の中心から6塩基対離れて結合 し、DNAの反対側に結合している。この図はプログラムM OLMOL(Koradi et al., 1996)及びGRASP(Nicholls eta 1., 1991)を使って作った。

【図6】



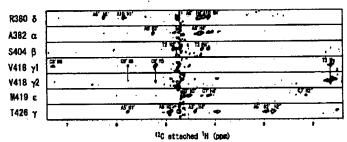


【図1】

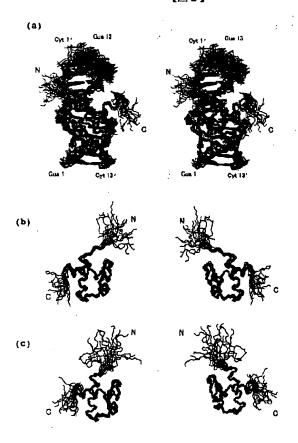


(b) 5'- GTTAGGGTTAGGG -3'
3'- CAATCCCAATCCC -5'

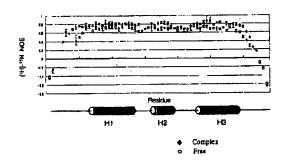
(c)



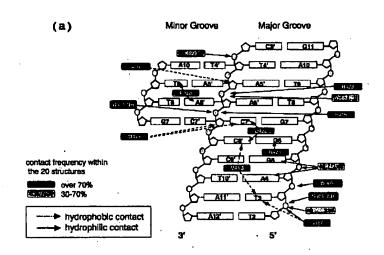
[図2]

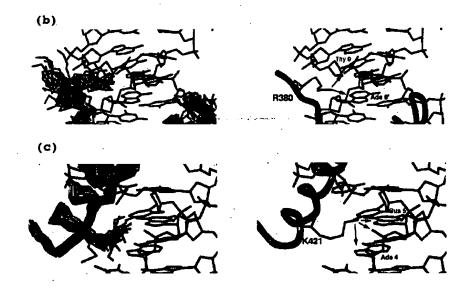


(d)

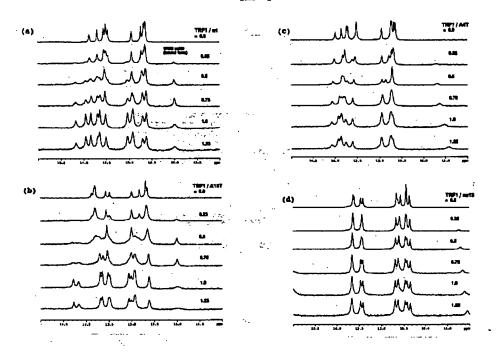


【図3】



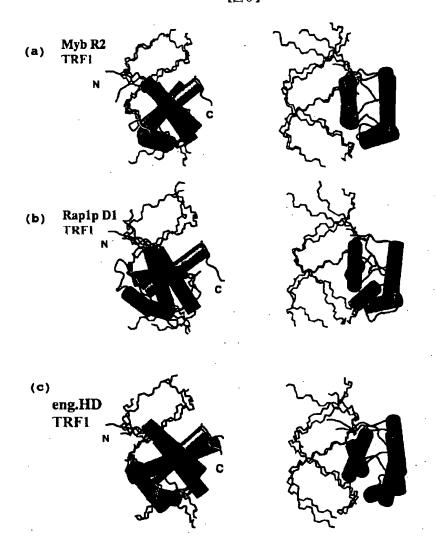


【図4】



(e) → fast wola 2 .3 ^ group 1 T3A A4G A4T // ns13 T9A T8A G5C A10T T8G G6C T8C G7C T9G A4TA1OT T9C A4CA10C T3AT9A' A4GA10G

【図5】



フロントページの続き

(51) Int.Cl.<sup>7</sup>

識別記号

FΙ G O 1 N 33/566

C 1 2 N 15/00

テーマコード(参考)

ZTDA

G O 1 N 33/53

33/566